

Univerza v Ljubljani

EKONOMSKA FAKULTETA BORISA KIDRIČA

MAGISTRSKO DELO

Zdravko Konjar

UNIVERZA V LJUBLJANI

EKONOMSKA FAKULTETA BORISA KIDRIČA

Z D R A V K O K O N J A R

MEŠALNI PROGRAM NELINEARNEGA PROGRAMIRANJA

V DO SAVA KRANJ

(m a g i s t r s k o d e l o)

MENTOR: PROF. DR. ALOJZIJ VADNAL

Ljubljana, maj 1978

VSEBINA

	Stran
UVOD	1
I. SESTAVLJANJE GUMENIH ZMESI	3
II. STATISTIČNO NAČRTOVANJE POIZKUSOV	13
2.1. Metoda najmanjših kvadratov	15
2.2. Ortogonalne sheme	17
2.3. Disperzijska funkcija eksperimentalne sheme in vrtljive sheme	20
2.4. Primeri vrtljivih shem drugega reda	27
2.5. Blokiranje poizkusov	30
III. METODE NELINEARNEGA PROGRAMIRANJA	37
3.1. Metoda konveksnih kombinacij	42
3.2. Metoda možnih smeri povečanja namenske funkcije	47
3.3. Teoretične lastnosti optimalne rešitve	51
3.4. Lagrangeva funkcija in njena sedlasta točka	53
3.5. Dualnost	55
IV. HARRINGTON-DERRINGERJEVA NAMENSKA FUNKCIJA	57
4.1. Transformacija fizikalnih količin v brezdimenzijsko skalo "d"	59
4.2. Metoda DEFUNCT	66
4.3. Metoda MINIMAX-D	72
V. RAČUNALNIŠKI PROGRAMI	75
5.1. Program za izpis testnih receptur	77
5.2. Program za določitev koeficientov polinomov	79
5.3. Program za reševanje nelinearnih programov	81

Uvod

Delovna organizacija Sava Kranj sodi med vodilne proizvajalce gumenih izdelkov in umetnega usnja v Jugoslaviji. Svoje mesto v gumarski industriji je dosegla predvsem po zaslugi uvajanja sodobne tehnologije v proizvodnjo, nekaj s pomočjo tujih partnerjev, največ pa z lastnimi razvojnimi programi. Predelava kavčuka v najraznovrstnejše gumene izdelke je zapleten fizikalno kemičen proces, v katerem je še veliko neznank. Najbolj splošna razčlenitev tega procesa poteka v treh fazah: prva je sestavljanje zmesi iz kavčuka, žvepla, kemikalij, pigmentov in polnil, druga faza je oblikovanje polizdelkov in tretja je vulkanizacija. Ker zavisijo lastnosti končnega izdelka predvsem od sestave gumene zmesi, je največ raziskovalnega dela posvečenega prav prvi fazi. V okviru delovne organizacije deluje razvojno-tehnološki inštitut, ki stalno spremlja razvoj gumarske tehnologije v svetu in uvaja nova tehnološka dognanja v proizvodnjo. Določanje razmerja med kavčukom in ostalimi komponentami zmesi je prav gotovo ena izmed najpomembnejših nalog inštituta pri uvajanju novih izdelkov, pri spreminjanju in zamenjavi dragih surovin za ekvivalente, vendar cenejše, ter pri izboljšanju kvalitete gumenih izdelkov. V literaturi srečamo celo vrsto najrazličnejših metod; od čisto eksperimentalnih, kjer na srečo iščemo najboljšo zmes in smo zadovoljni, ko vsaj približno zadostimo postavljenim zahtevam, do zelo kompliciranih modelov, ki jih lahko rešimo edinele s pomočjo računalnika. Slednje srečamo v literaturi šele zadnjih petnajst let in so po letu 1970 postale že zelo uporabne metode za izračunavanje najbolj ustreznih gumenih zmesi.

V letu 1973 je Sava osnovala lasten računski center. To je bila priložnost za uvajanje novih metod tudi v našem raziskovalnem delu, še posebej, ker smo že na začetku osnovali v računskem centru skupino strokovnjakov z različnih področij.

Osnovna naloga te ekipe je skrb za čim širšo uporabo metod operacijskega raziskovanja. Načrtno smo zbirali različno literaturo in programske pakete, sami napisali celo vrsto programov za reševanje raznih problemov s tehnološkega in ekonomskega področja ter skrbeli za popularizacijo možnosti, ki nam jih nudi lasten računalnik med uporabniki zunaj centra. Dosegli smo pomembne uspehe in danes si ne moremo zamisliti raziskovalnega dela brez pomoči računalnika. Razvijanje novih zmesi s pomočjo računalnika dolgo časa ni prav zaživel. Razlogov je bilo več, glavni pa je bil pomanjkljivo teoretično znanje. Pravzaprav nismo prišli dlje od statističnega načrtovanja poizkusov, regresijske analize in risanja odvisnosti različnih fizikalnih lastnosti od variiranih elementov zmesi. Ob vsej množici neznank nismo znali poiskati pravega optimuma. Še danes ne najdemo v literaturi teoretično neoporečne metode, ki bi nam dala algoritem za iskanje resnično najboljše zmesi. Razlog je prav gotovo v naravi gume same, ki je zelo komplicirana snov. V praksi smo zadovoljni že veliko prej. Danes poznane metode dajo dovolj dobre rezultate, če smo le dovolj natančni pri izvajanju eksperimentov v laboratoriju.

Pričujoče delo bo skušalo prikazati reševanje problema mešanja gumenih zmesi po metodi, ki jo naši tehnologi že s pridom uporabljajo. Metoda sama upošteva vse do sedaj poznane prijeme in bo prav gotovo doživela še veliko sprememb, v skladu z razvojem tehnologije sestavljanja zmesi. Ob tej priliki bi se rad zahvalil sodelavcem iz razvojno-tehnološkega inštituta, posebej inženirju Zoranu Šušteriču za veliko pomoč pri nastajanju tega dela.

I. SESTAVLJANJE GUMENIH ZMESI

Razen zelo redkih primerov dodajamo kavčuku vedno še druge primesi, preden dobimo končen izdelek. Sestavljanje gumenih zmesi zavisi od vrste uporabe gumenega izdelka in metode, po kateri sestavimo zmes. Lastnosti naravnega kavčuka in mnogih vrst sintetičnih kavčukov so takšne, da jih lahko uporabimo v masovni proizvodnji. Lahko jih pretvorimo v plastično ali termoplastično stanje ter jih oblikujemo ali vkalupimo v kakršnokoli željeno obliko. Kavčuki so tudi lepljivi in topljivi, kar omogoča mešanje z mnogimi snovmi. Lastnost gume (vulkaniziranega kavčuka) so povsem drugačne: zavisijo sicer od vrste uporabe, v splošnem pa so lastnosti gume elastičnost, žilavost, odpornost proti preperevanju (staranju), nelepljivost in neplastičnost. Zelo pomembno je dejstvo, da večino fizikalnih lastnosti gume (modul elastičnosti, natezna trdnost, trdota, sila izvlačanja metalnih in tekstilnih vložkov itd.) in tudi ceno lahko znatno spreminjamo z dodajanjem kemikalij, pigmentov in mehčal ter raznimi metodami vulkanizacije. Vulkanizacija je fizikalno-kemični proces zamreževanja kavčukovih makromolekul, pri katerem se neobstoje lastnosti kavčuka, ki je neodporen, plastičen, topljiv in lepljiv, spremenijo v takšne, kakršne pač zahtevamo: produkt vulkanizacije je žilav, odporen, elastičen, nelepljiv in netopljiv.

V proizvodnji opišemo sestavljanje zmesi z dvema dokumentoma: mešalnim predpisom in recepturo. V mešalnem predpisu povemo zaporedje delovnih operacij in njihovo trajanje. Isto vrsto zmesi lahko sestavimo na različnih vrstah strojev, zato so mešalni predpisi sestavljeni za vsako vrsto strojev posebej. Receptura je tabela, v kateri izrazimo razmerje med količino kavčuka in količinami ostalih komponent zmesi.

Količine kemikalij, pigmentov in mehčal izražamo v utežnih enotah na sto delov kavčuka. Kot primer si pogledjmo recepturo za tekalno površino avtoplašča iz naravnega kavčuka.

TABELA 1	delov	toleranca
naravni kavčuk	100	
žveplo	3	0,0 - 50,0
pospeševalec	1	0,3 - 3,0
cinkov oksid	5	2,0 - 10,0
stearinska kislina	1	0,0 - 4,0
antioksidant	1	0,0 - 3,0
mehčalo	5	2,5 - 50,0
pigment /saje/	50	20,0 - 300,0
S k u p a j	166	

V koloni "toleranca" smo označili interval, v katerem lahko variiramo kavčuku dodane snovi v zmesi. Tako dobimo neskončno število receptur in seveda tudi zelo različne vrste gum. Prav gotovo je, da ne moremo zmešati vseh možnih receptur in meriti fizikalne lastnosti na vseh tolerančnih intervalih. Navadno je v recepturi preveč komponent, da bi mogli variirati prav vse. Odločimo se za tiste, ki v največji meri vplivajo na kvaliteto zmesi.

Lastnosti gumene zmesi in tudi končnega izdelka opisujemo z različnimi fizikalnimi količinami, ki jih merimo na posebnih napravah v laboratoriju in jih v večini primerov srečamo samo v gumarstvu. Omenili bomo le najpomembnejše.

Prožnost gume merimo z modulom 100, modulom 200 in modulom 300. To so v kp/cm^2 izražene napetosti, ki so potrebne, da raztegnemo gumo za 100 %, 200 % oziroma 300 %. Napetost, izmerjeno ob pretrganju gumenega traku, imenujemo natezna trdnost. Trdoto gume merimo na posebni napravi, imenovani shoremeter in jo izražamo v shore-ih /izg. šor/. V bistvu merimo, za koliko se pogrezne igla v gumo pri dani sili. Tudi viskoznost gume merimo na posebnih napravah in jo izražamo v standardiziranih Mooneyevih enotah, imenujemo pa jo mooney plastičnost. Modul elastičnosti lahko uporabljamo le pri takšnih raztezkih, kjer velja linearni Hookov zakon. Zelo pomemben podatek je t-90. To je čas, v katerem se 90 % vulkanizacijskega sredstva zamreži v molekule kavčuka in nam pove hitrost vulkanizacije. Kot zadnjo omenimo še lastnost, ki je zelo pomembna v proizvodnji avtomobilskih gum, klinastih jermenov, transportnih trakov itd. Imenujemo jo H-test in je spet v posebnih enotah izražena sila, potrebna za izvlačenje korda iz gume.

Naloga tehnologa – sestavljalca zmesi je določitev tolerančnih intervalov, v katerih morajo biti vrednosti navedenih fizikalnih lastnosti gume. Pri tem mora najprej zadostiti zahtevam končnega izdelka. Nadalje mora upoštevati tudi metode predelave gume /mešanje, kalandriranje*, brizganje in oblikovanje v kalupih ter hitrost vulkanizacije/, ker stroški proizvodnje močno zavisijo od predelovalnih lastnosti gume. Poznati mora možnosti in karakteristike predelave na razpoložljivih strojih in tudi tipe zmesi, ki jih uporabljamo v nadaljnjih fazah proizvodnje. Kot rezultat vseh teh analiz dobimo recepture in tehnološke postopke /delovne načrte/, po katerih proizvedemo izdelek z najmanjšimi možnimi stroški.

* izdelava zmesi na posebnih strojih - kalandrih

Oglejmo si zdaj, kako vplivajo posamezne vrste snovi, ki nastopajo v gumeni zmesi, na fizikalne in predelovalne lastnosti gume.

Osnovna komponenta vsake gumene zmesi je kavčuk. Naravni plantažni kavčuk je bil vse do sredine obdobja med obema vojnama edina masovno uporabna snov za proizvodnjo gume. Po drugi svetovni vojni se je uporaba naravnega kavčuka močno zmanjšala na račun novih vrst sintetičnih kavčukov. Le-te delimo na splošne in posebne. Splošni sintetični kavčuki imajo enake lastnosti kot naravni kavčuk in jih uporabljamo v iste namene. Posebni kavčuki so tisti, ki približno ali povsem odgovarjajo dobrim fizikalnim lastnostim naravnega kavčuka, so pa boljši od njega v nekaterih specialnih zahtevah, kot so: obstojnost na zraku, možnost predelave, trdota pri nizkih temperaturah in odpornost proti kvarnim vplivom olj, topil, svetlobe, toplote, ozona in raznih kemikalij. Prav zaradi teh dobrih lastnosti so posebni kavčuki precej dražji od naravnega kavčuka. Prva naloga tehnologa pri sestavljanju zmesi je torej izbor primerne vrste kavčuka.

Vulkanizacijska sredstva so snovi, ki se procesu vulkanizacije vgradijo (zamrežijo) med molekule kavčuka in aktivno sodelujejo pri spreminjanju fizikalnih lastnosti kavčuka v lastnosti gume. Ocenjeno je, da 90 do 95 % vseh gumenih zmesi vulkaniziramo z žveplom. Pri nekaterih vrstah sintetičnih kavčukov uporabljamo drugačna vulkanizacijska sredstva, kovinske okside in nekatere organske snovi. S pravilnim izborom vulkanizacijskega sredstva lahko dobimo gumo s specialnimi lastnostmi npr.: odpornost proti vročini.

Povsod tam, kjer uporabljamo žveplo kot vulkanizacijsko sredstvo, dodajamo zmesi še pospeševalce za povečanje hitrosti vulkanizacije in izboljšanje nekaterih fizikalnih lastnosti gume, kot je npr. povečanje odpornosti proti staranju. Pospeševalci so organske snovi in je možno ob njihovi pravilni kombinaciji vulkanizirati kavčuk pri zelo različnih temperaturah in v skoraj poljubnem časovnem intervalu. Mnoge pomembne fizikalne lastnosti gume lahko spreminjamo v določenih tolerancah s primerno izbiro pospeševalca in količine žvepla, oziroma s pravilnim razmerjem žveplo – pospeševalec. To so čas do začetka vulkanizacije, čas vulkanizacije in čas nasičene zamrežitve. Časovni interval do začetka vulkanizacije je pomemben za skladiščenje zmesi in polizdelkov; če je prekratek, lahko pride do vulkanizacije gume že v skladišču, kar zelo slabo vpliva na nadaljnje predelavne lastnosti in kvaliteto gume. Čas vulkanizacije je interval od začetka zamreževanja do popolne vulkaniziranosti gume. Čim krajši je, tem manjši so proizvodni stroški, ker so največkrat prav stroji za vulkanizacijo gume ozka grla v proizvodnji. Čas nasičenja pove življenjsko dobo izdelka. Čim daljši je, bolj je guma odporna proti staranju. Večini pospeševalcev je potrebno dodati manjše količine aktivatorjev /cinkovega oksida, maščobne kisline itd./, ki aktivirajo pospeševalce pri vulkanizaciji.

Staranje gume poteka na zraku zaradi oksidacije. Organske spojine, ki preprečujejo razpadanje gume na zraku, se imenujejo antioksidanti in antiozonanti. Te snovi preprečujejo polimerizacijo pri sintetičnih kavčukih, kvarjenje gume zaradi upogibanja, vročine in svetlobe.

Gumeni izdelki, ki bi jih proizvajali samo iz kavčuka, žvepla in pospeševalcev, bi bili zelo dragi. V praksi dodajamo veliki večini gumenih zmesi še različna polnila, pigmente in mehčala.

Z njimi dobimo veliko cenejše izdelke in hkrati močno vplivajo na vse merljive fizikalne lastnosti gume, predvsem na modul elastičnosti, natezno trdnost in trdoto gume.

Pigmenti so prašnate snovi, ki jih dodajamo zmesem za bolj enakomerno porazdelitev ostalih sestavin v zmesi. Nekatere uporabljamo samo za barvanje gume, drugi pa povečujejo natezno trdnost, modul, zarezno trdnost in še nekatere fizikalne lastnosti. Najpomembnejši pigment so saje. Tudi cinkov oksid uporabljamo kot pigment, hkrati pa ga večina pospeševalcev potrebuje za dobro učinkovitost. Pred odkritjem aktivnih saj so uporabljali cinkov oksid kot najboljši pigment in ga ponekod še danes, vendar je precej drag. Druga skupina aktivnih polnil so specialno pripravljene silikati. Kaolin in druge vrste glin uporabljamo zaradi nizkih cen in ker izboljšujejo vulkaniziranim in tudi surovim zmesem trdoto in žilavost. Naslednja skupina pigmentov so različni kalcijevi karbonati /apno, apnenec/. Uporabljamo jih kot polnila, so poceni in ne vplivajo na lastnosti gumenih zmesi, pač pa uravnavajo delovanje ostalih sestavin v zmesi. Najpomembnejši pigment za barvne zmesi je titanovo belilo. To je osnovna sestavina ne le belih zmesi, temveč tudi vseh barvnih.

Prav nazadnje moramo omeniti še snovi pod skupnim imenom mehčala. Z njimi omehčamo kavčuk in povečamo dobre predelovalne lastnosti zmesi. Za naravni kavčuk uporabljamo v ta namen različna olja in smole. S prodorom sintetičnih kavčukov se je pojavila na tržišču cela vrsta snovi, s katerimi povečujemo plastičnost in termoplastičnost gume, preprečujemo zmrzovanje gume, dosegamo bolj enakomerno porazdelitev pigmentov v gumi itd.

Sestavljalci zmesi vedo iz izkušenj, kako spreminjajo različne vrste kemikalij v različnih dozah lastnosti gume, dokler variiramo samo eno ali dve komponenti zmesi. V enostavnejši zmesi navadno nastopa poleg kavčuka še kakih pet komponent, v bolj kompliciranih pa tudi deset in več. V splošnem si še tako izkušen tehnolog ne more predstavljati, kakšen bo skupen vpliv vseh komponent na neko fizikalno lastnost. Še do pred nekaj leti smo si pomagali z zaporedjem poizkusov, kjer smo na osnovi izkušenj spreminjali v zmesi tiste elemente, ki so najbolj vplivali na željeno kvaliteto zmesi in ponavljali poizkuse vse dotlej, dokler nismo našli recepture, ki je v glavnem ustrezala zahtevam. Vprašanje pa, ali smo zares našli najustreznejšo zmes ali ne, je ostalo odprto. Danes vemo, da je takšen način le zelo malokrat dal najboljšo možno zmes. Hkrati se je postavilo še vprašanje "najboljše" zmesi. Rekli smo že, da moramo najprej zadostiti zahtevam končnega izdelka. Nekatere zahteve lahko dobro opišemo z znanimi fizikalnimi količinami, obstajajo pa še takšne, ki jih ne moremo /na primer ustreznost barvne nianse, enakomerna razpršitev pigmenta itd./. Pri našem nadaljnjem delu se bomo omejili le na takšne fizikalne lastnosti, ki jih lahko izmerimo v laboratoriju, popravljanje zmesi zaradi drugačnih, težko merljivih zahtev, pa bomo prepustili izkušenim tehnologom. Denimo, da smo opisali zahteve končnega izdelka z dobro definiranimi fizikalnimi količinami in določili intervale, v katerih se morajo le-te nahajati, da je izdelek še uporaben.

Naslednja zahteva, ki močno vpliva na proizvodnjo, je težavnostna stopnja mešanja zmesi in predelave zmesi v končne izdelke. Tu naletimo na podobne probleme kot prej.

Vendar pa izkušeni tehnologi, ki dobro poznajo zahteve obstoječih strojnih kapacitet, vedo, kako zavisijo nefizikalne predelavne lastnosti /npr. "zmes se dobro vkalupi" ali "se lahko vleče v plošče"/ od znanih merljivih fizikalnih količin /modulov 100, 200, 300, trdote, Mooney plastičnosti itd./. Tako dobimo nov niz intervalov, v katerih morajo biti izbrane fizikalne količine, da zadostimo predelovalnim zahtevam. Skupne zahteve so preseki teh intervalov z intervali zahtev končnega izdelka. Vsaka zmes, ki ima takšne fizikalne lastnosti, da so v obeh skupinah zahtev, je dobra zmes, če so bili seveda intervali izbrani dovolj dobro. Med dobrimi zmesmi iščemo najboljšo po enem izmed kriterijev optimalnosti. V praksi so se uveljavili naslednji trije:

- najcenejša zmes
- zmes z najboljšo izbrano fizikalno lastnostjo
- zmes z največjo geometrijsko sredino vseh merjenih fizikalnih lastnosti

Pri zadnji možnosti lahko upoštevamo kot posebno lastnost tudi ceno zmesi.

Zakaj sta avtorja Harrington in Derringer izbrala prav geometrijsko sredino bomo spoznali v četrtem poglavju.

Povrnimo se k problemu odvisnosti fizikalnih lastnosti od različnih količin elementov zmesi. V splošnem velja, da zaenkrat še ne poznamo fizikalnih zakonov, ki bi opisali te odvisnosti, niti za najpogostejše sestavine zmesi – vulkanizacijska sredstva. Postavlja se vprašanje, če je sploh mogoče najti ustrezne zakone in jih izraziti z običajno matematično formulacijo. Fizika gume je zaradi makromolekularne zgradbe gume izredno komplicirana in še malo raziskana. Prav na tem področju deluje v našem razvojno-tehnološkem inštitutu skupina fizikov in že dosega spodbudne rezultate predvsem pri problemih vulkanizacije. Pri problemih sestavljanja zmesi si povsod po svetu pomagajo s statističnimi metodami.

V naslednjem poglavju si bomo podrobno ogledali statistično načrtovanje poizkusov in določitev odvisnosti fizikalnih vrednosti od elementov zmesi s pomočjo regresijske analize. Izkazalo se je, da to odvisnost na primerno izbranih intervalih lahko dovolj točno aproksimiramo s polinomom druge stopnje in samo v zelo izjemnih primerih s polinomom višjega reda ali pa s kakšno drugačno funkcijo. Prav tako velja, da polinom prve stopnje da premalo natančno aproksimacijo. Torej lahko zapišemo problem iskanja optimalne zmesi v naslednji obliki:

/1.1/ iščemo optimum $c(X)$ pri pogojih

$$/1.2/ \quad S_i \leq A_i(X) \leq Z_i \quad i = 1, 2, \dots, m$$

$$/1.3/ \quad s_j \leq x_j \leq z_j \quad j = 1, 2, \dots, k$$

kjer je $c(X)$ izbrana namenska funkcija (cena zmesi, fizikalna lastnost ali geometrijska sredina fizikalnih lastnosti), x_j količine variiranih elementov recepture (neodvisne spremenljivke) s spodnjo mejo s_j in zgornjo mejo z_j , $X^T = (x_1, x_2, \dots, x_k)$ vektor neodvisnih spremenljivk ter $A_i(X)$ polinom drugega reda, ki na intervalu $[S_j, Z_j]$ dovolj dobro aproksimira i -to fizikano lastnost zmesi:

/1.4/

$$A_i(x_1, x_2, \dots, x_k) = a_0^{(i)} + \sum_{j=1}^k a_j^{(i)} x_j + \sum_{j=1}^k \sum_{l=j}^k a_{jl}^{(i)} x_j x_l$$

Kot vidimo, imamo opravka z nelinearno namensko funkcijo in nelinearnimi omejitvami, zato smo z /1.1/ do /1.4/ definirali problem nelinearnega programiranja. Reševanju takih nelinearnih programov se bomo posvetili v tretjem poglavju.

V tabeli I na strani 4 smo podali recepturo zmesi za tekalno površino avtoplašča in intervale, v katerih lahko spreminjamo količine delov zmesi. Recepturo, ki je sestavljena iz enakih sestavin, pri čemer vzamemo količine v središčih intervalov, imenujemo osnovno ali ničelno recepturo. Vedno najprej določimo intervale, v katerih variiramo primesi in šele nato ničelno recepturo. Njen pomen bomo spoznali v naslednjem poglavju. Določitev toleranc poteka na več načinov. Največkrat zajamemo v tolerance vse recepture, ki jih je praktično še možno zmešati. Pri raziskovanju kakšnih posebnih lastnosti zmesi določimo mnogo ožje intervale. Prav tako je pomembno, katere dele zmesi variiramo bolj, katere manj, katerih pa sploh ne. Določitev koeficientov polinoma /1.4/ in njihova disperzija sta odvisni od števila opravljenih poizkusov. Praktično je skoraj nemogoče narediti več kot 50 testnih receptur, zato običajno spreminjamo 3 – 5 delov zmesi in merimo 3 – 10 fizikalnih lastnosti.

Določitev optimalne recepture poteka torej v naslednjih fazah:

- določitev najvažnejših merljivih fizikalnih lastnosti, ki kar najbolje opišejo kvaliteto zmesi,
- določitev osnovne /ničelne/ recepture in toleranc,
- laboratorijsko mešanje izbranega števila receptur, določenega bodisi po izkustvu ali pa po izbrani statistični shemi,
- merjenje izbranih fizikalnih lastnosti za vse dobljene zmesi,
- določitev funkcijske odvisnosti fizikalnih lastnosti od variiranih elementov receptur s pomočjo statističnih metod /regresijska analiza/,
- določitev kriterija optimalnosti in optimizacija.

II. STATISTIČNO NAČRTOVANJE POIZKUSOV

V prejšnjem poglavju smo spoznali, da obstajajo med fizikalnimi količinami in komponentami zmesi neke odvisnosti, ki v splošnem niso linearne. Rekli smo, da jih v praksi najustrezneje aproksimiramo s polinomom drugega reda. Ustreznost te aproksimacije v vsakem posameznem primeru preverjamo z znanimi metodami regresijske analize in analize variance, zato bomo brez dokazovanja privzeli naveden način prikazovanja odvisnosti, kot ga najdemo povsod v gumarski industriji. Teoretično so obdelali načrtovanje poizkusov, kakršno uporabljamo pri razvijanju novih zmesi, avtorji G. E. P. Box, K. B. Wilson in J. S. Hunter, zato imenujemo postopke za določitev aproksimativnega polinoma največkrat kar Box-Wilsonova metoda /2/.

Denimo, da smo v neki recepturi določili k komponent, ki največ vplivajo na neko fizikalno lastnost, ki jo opišemo z odvisno spremenljivko η . Če označimo količine posameznih komponent v zmesi ξ_i , potem obstaja neka relacija med odvisno spremenljivko η in vrednostmi neodvisnih spremenljivk ξ_i :

$$/2.1/ \quad \eta = \varphi (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k)$$

Prav tako smo določili ničelno recepturo in intervale, v katerih morajo biti vrednosti spremenljivk ξ_i . Da bi lahko s statističnimi metodami določili koeficiente aproksimativnega polinoma za relacijo /2.1/, moramo v laboratoriju zmešati N testnih receptur in pri vsaki izmeriti vrednost fizikalne količine η . Naša naloga je določiti N testnih receptur tako, da bo polinom na danih intervalih dovolj dobro aproksimiral relacijo φ . V veliko pomoč pri tem nam je geometrična predstavitev problema.

k – variiranih komponent zmesi določa k – dimenzionalni evklidski prostor s koordinatnim izhodiščem v ničelni recepturi. Na koordinatne osi navadno nanašamo standardizirane spremenljivke:

$$/2.2/ \quad x_{iu} = \frac{(\xi_{iu} - \bar{\xi}_i)}{S_i} \quad \text{kjer je} \quad S_i = \sqrt{\sum_{u=1}^N \frac{(\xi_{iu} - \bar{\xi}_i)^2}{N/c}}$$

$i = 1, 2, \dots, k$
 $u = 1, 2, \dots, N$

Za standardizirane spremenljivke velja:

$$/2.3/ \quad \sum_{u=1}^N x_{iu} = 0 \quad \text{in} \quad \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = \frac{N}{c}$$

Pomen konstante c bomo spoznali kasneje. Zapišimo zdaj koordinate standardiziranih spremenljivk za N eksperimentov v matriko D dimenzije $N \times k$, ki jo bomo odslej imenovali eksperimentalna shema reda d, kjer je d stopnja polinoma, ki ga določimo s pomočjo eksperimentalnih točk zapisanih v shemi D. Število eksperimentov N mora biti vsaj tolikšno, kot je koeficientov polinoma stopnje d, namreč $\binom{k+d}{d}$.

Poglejmo si zahteve, katerim morajo zadoščati eksperimentalne sheme. Niso vse enako pomembne, vendar pa težimo k temu, da dobimo takšne sheme, ki v praksi omogočajo kar najbolj racionalno delo v laboratoriju ob primerni kvaliteti aproksimacije.

- a. Shema eksperimentov mora omogočiti določitev koeficientov polinoma stopnje d, ki dovolj točno aproksimira relacijo na vsej množici točk, ki jo raziskujemo.

- b. Dati nam mora informacijo o primernosti izbora stopnje polinoma.
- c. Ne sme vsebovati preveč eksperimentalnih točk.
- d. Omogočiti mora blokiranje eksperimentov.
- e. Mora biti osnova za dobro shemo reda $d+1$, če izbrani polinom ni dovolj točna aproksimacija.

Najprej ugotovimo, da so v našem primeru factorske sheme neprimerne, ker ne zadoščajo pogoju c, čeprav zadoščajo vsem ostalim pogojem. Faktorska shema ima namreč $(d+1)^k$ točk, kar je npr. pri recepturi s petimi spremenljivkami že $3^5 = 243$ eksperimentov. Zato bomo poiskali drugačne vrste eksperimentalnih shem, predvsem ortogonalne in vrtljive, ki skupaj z metodo najmanjših kvadratov dajo najboljše aproksimacije relacije φ .

2.1 Metoda najmanjših kvadratov

V neki poljubni eksperimentalni točki x_u lahko aproksimiramo relacijo φ s poljubnim polinomom stopnje d , tako da velja:

$$\begin{aligned} /2.4/ \quad \eta_u = & \beta_0 x_{0u} + \beta_1 x_{1u} + \dots + \beta_k x_{ku} + \\ & \beta_{11} x_{1u}^2 + \dots + \beta_{kk} x_{ku}^2 + \\ & \beta_{12} x_{1u} x_{2u} + \dots + \beta_{k-1,k} x_{k-1,u} x_{ku} + \beta_{111} x_{1u}^3 + \dots \end{aligned}$$

Spremenljivke $x_0, x_1, \dots, x_k, x_1^2, \dots, x_k^2, x_1 x_2, \dots, x_{k-1} x_k$ bomo imenovali "neodvisne spremenljivke", čeprav seveda pri $d > 1$ niso funkcijsko neodvisne. Sistem enačb za vseh N eksperimentalnih točk lahko zapišemo v matrični obliki:

$$/2.4a/ \quad \eta = X \beta$$

kjer je η vektor fizikalnih vrednosti v eksperimentalnih točkah, X matrika vrednosti "neodvisnih spremenljivk" dimenzije $N \times L$ in β vektor neznanih koeficientov polinoma ter $L = \binom{k+d}{d}$ število koeficientov polinoma. Matriko X dobimo iz eksperimentalne sheme D tako, da ji dodamo vektor konstantnih členov x_{0u} , vektorje kvadratičnih in mešanih členov. Naj bo Y vektor izmerjenih fizikalnih vrednosti z matematičnim upanjem $E(Y) = \eta$ in disperzijo $E(Y-\eta) (Y-\eta)^T = I_{N\sigma}^2$; potem ob predpostavki, da model /2.4a/ natančno opisuje resnično odvisnost, izračunamo koeficiente aproksimativnega polinoma tako, da poiščemo

$$\min \{ (\hat{Y} - Y)^T (\hat{Y} - Y) \}$$

kjer je $\hat{Y} = X B$ vektor izračunanih fizikalnih vrednosti iz polinoma stopnje d s koeficienti $b_0, b_1, \dots, b_k, b_{11}, \dots, b_{kk}, b_{12}, \dots$ zapisanih v obliki vektorja B . Ocene koeficientov β po metodi najmanjših kvadratov so nepristranske (to je $E(B) = \beta$) in imajo najmanjšo možno disperzijo. Dobimo jih iz

$$/2.5/ \quad B = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

Metoda najmanjših kvadratov nam da tudi oceno o pravilnem izboru stopnje polinoma. Če namreč model $\eta = X\beta$ ni dovolj natančen in je treba dodati še L_1 členov višjega reda $X_1 \beta_1$ tako, da postane model primeren, torej da velja

$$\eta = X\beta + X_1 \beta_1$$

potem z enačbo /2.5/ izračunani koeficienti B niso več nepristranske ocene koeficientov β ; njihovo matematično upanje je namreč v tem primeru

$$E(B) = \beta + A\beta_1$$

kjer je matrika $A = (X^T X)^{-1} X^T X_1$ (/2/ stran 198).

V enačbi /2.5/ nastopa matrika $X^T X$, ki ima zelo pomembno vlogo pri iskanju eksperimentalnih shem. Matriko $N^{-1} X^T X$ imenujemo matriko momentov sheme, recipročno vrednost $N(X^T X)^{-1}$ pa matriko natančnosti sheme. Kot primer si pogledjmo matriko momentov pri shemah drugega reda z dvema spremenljivkama. Enačba /2.4/ je v tem primeru

$$/2.6/ \quad \eta = \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2$$

in matrika momentov $N^{-1} X^T X$

$$\begin{array}{c}
 \mathbf{0} \quad \mathbf{1} \quad \mathbf{2} \quad \mathbf{11} \quad \mathbf{22} \quad \mathbf{12} \\
 \left[\begin{array}{cccccc}
 1 & [1] & [2] & [11] & [22] & [12] \\
 [1] & [11] & [12] & [111] & [122] & [112] \\
 [2] & [12] & [22] & [112] & [222] & [122] \\
 [11] & [111] & [112] & [1111] & [1122] & [1112] \\
 [22] & [122] & [222] & [1122] & [2222] & [1222] \\
 [12] & [112] & [122] & [1112] & [1222] & [1122]
 \end{array} \right]
 \end{array}$$

Z oglatimi oklepaji smo označili momente sheme. Na primer:

$$[1] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{1u} \quad , \quad [112] = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N x_{1u}^2 x_{2u} \quad \text{itd.}$$

2.2 Ortogonalne sheme

Problem izbora najboljše sheme za aproksimacijo modela $\eta = X\beta$ navadno določimo z zahtevo, da mora biti eksperimentalna shema D takšna, da so koeficienti β ocenjeni z najmanjšo možno disperzijo. Pri linearnem modelu ($d=1$), ko so neodvisne spremenljivke tudi funkcijsko neodvisne, zadostimo tej zahtevi takrat, ko je matrika $X^T X$ diagonalna.

Ustrezna eksperimentalna shema D se v tem primeru imenuje ortogonalna. Ne glede na red sheme imenujemo ortogonalno vsako takšno eksperimentalno shemo, pri kateri je matrika momentov diagonalna (/2/ stran 199).

Ortogonalne sheme drugega reda dobimo tako, da transformiramo "neodvisne spremenljivke" v ortogonalne polinome. Po definiciji je polinom m-te stopnje

$$x_i^{(m)} = x_i^m + \alpha_{m-1,m} x_i^{m-1} + \dots + \alpha_{1m} x_i + \alpha_{0m}$$

ortogonalen takrat, kadar velja

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^{(m)} x_{iu}^{(m-p)} = 0 \quad p = 1, 2, \dots, m$$

Model /2.4a/ zdaj lahko zapišemo takole:

$$\eta = (XP) (P^{-1} \beta) = \dot{X} \dot{\beta}$$

kjer je P matrika linearne transformacije, ki prevede stare spremenljivke v nove. Vektor \dot{X} je torej vektor ortogonalnih polinomov in $\dot{\beta}$ je ustrezno transformiran vektor koeficientov polinoma osnovnega modela /2.4a/. Kot primer si pogledjmo dvodimenzionalno shemo drugega reda. Prav hitro se lahko prepričamo, da sta ortogonalna polinoma prve in druge stopnje:

$$x_i^{(1)} = x_i \quad \text{in} \quad x_i^{(2)} = x_i^2 - [iii]x_i - 1$$

Enačba /2.6/ se v novih spremenljivkah glasi:

$$/2.8/ \quad \eta = (\beta_0 + \beta_{11} + \beta_{22}) x_0 + (\beta_1 + [111] \beta_{11}) x_1 + \\ + (\beta_2 + [222] \beta_{22}) x_2 + \beta_{11}(x_1^2 - [111] x_1 - 1) + \\ + \beta_{12}(x_2^2 - [222]x_2 - 1) + \beta_{12} x_1 x_2$$

in matrika momentov $N^{-1} \dot{X}^T \dot{X}$

$$\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 11 \\ 22 \\ 12 \end{array} \left[\begin{array}{cccccc} 0 & 1 & 2 & 11 & 22 & 12 \\ 1 & . & . & . & . & a \\ . & 1 & a & . & b & c \\ . & a & 1 & d & . & e \\ . & . & d & f & g & h \\ . & b & . & g & i & j \\ a & c & e & h & j & k \end{array} \right]$$

kjer je

$$\begin{aligned} a &= [12], \\ b &= [122] - [222] [12], \\ c &= [112], \\ d &= [112] - [111] [12], \\ e &= [122], \\ f &= [1111] - [111]^2 - 1, \\ g &= [1122] + [111] [222] [12] - [111] [122] - \\ &\quad - [222] [112] - 1, \\ h &= [1112] - [111] [112] - [12], \\ i &= [2222] - [222]^2 - 1, \\ j &= [1222] - [222] [122] - [12], \\ k &= [1122]. \end{aligned}$$

Matrika momentov /2.9/ postane diagonalna, če določimo:

$$/2.10/ \quad [12] = [112] = -[122] = [1112] = [1222] = 0 \\ \text{in } [1122] = 1.$$

Eksperimentalne sheme te oblike sta izdelala avtorja Box in Wilson in so bile prve sheme, ki smo jih uporabili pri načrtovanju poskusov. Vendar imajo precej pomanjkljivosti. Prva je prav gotovo ta, da nismo z ničemer opravičili izbora /2.10/. Tudi pri drugačni kombinaciji momentov bi še lahko dobili ortogonalno matriko /2.9/. Druga, najpomembnejša pomanjkljivost Box-Wilsonovih ortogonalnih shem pa je v tem, da določajo koeficiente polinoma z različno relativno natančnostjo, ker imamo na diagonalni matriki /2.9/ izraze $[iiii] - [iii]^2 - 1$, ki so v splošnem različni od 1. Avtorja sta se zavedala teh slabosti in sta poiskala boljše rešitve. Ob študiju vpliva rotacije koordinatnega sistema na matriko momentov sta ugotovila, da je ortogonalnost sistema odvisna od orientacije koordinatnega sistema v prostoru k neodvisnih spremenljivk. Če namreč zavrtimo koordinatni sistem, ki smo ga postavili v k -dimenzionalni evklidski prostor neodvisnih spremenljivk za nek kot φ , izgubimo ortogonalnost pri Box-Wilsonovih shemah. Tudi kvaliteta aproksimacije (točnost izračunanih koeficientov polinoma) močno zavisi od relativne orientacije v prostoru neodvisnih spremenljivk. Temu pojavu se izognemo tako, da ne merimo učinkovitosti eksperimentalne sheme z disperzijami koeficientov polinoma, temveč z disperzijo vrednosti merjene fizikalne količine. Avtorja Box in Hunter sta v ta namen definirala pojem disperzijske funkcije eksperimentalne sheme.

2.3. Disperzijska funkcija eksperimentalne sheme in vrtljive sheme

Denimo, da smo aproksimirali neko fizikalno količino na množici možnih receptur s polinomom stopnje d . Definirajmo vektor $\mathbf{x}^T = (1, x_1, x_2, \dots, x_k)$ tako, da dodamo pred standardizirane spremenljivke, ki določajo neko možno recepturo, še 1.

Tedaj lahko zapišemo izračunano vrednost fizikalne količine y v točki (x_1, x_2, \dots, x_k) .

$$\begin{aligned} /2.10/ \quad \hat{y}_x &= b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_k x_k + b_{11} x_1^2 + \dots + \\ &+ b_{kk} x_k^2 + b_{12} x_1 x_2 + \dots + b_{k-1,k} x_{k-1} x_k + \\ &+ b_{111} x_1^3 + \dots \end{aligned}$$

oziroma v vektorski pisavi:

$$/2.11/ \quad \hat{y}_x = X^{T[d]} \cdot b$$

kjer je $X^{T[d]}$ vektor vseh produktov koordinat vektorja x do potence d s tako izbranimi koeficienti, da velja

$$X^{T[d]} x^{[d]} = (X^T X)^{[d]},$$

vektor b pa izbran tako, da sta izraza /2.10/ in /2.11/ ekvivalentna. Podobno zapišemo tudi dejansko vrednost fizikalne količine v točki (x_1, x_2, \dots, x_k) :

$$\eta_x = X^{T[d]} \beta$$

Disperzijsko funkcijo eksperimentalne sheme D , pri kateri ima matrika "neodvisnih spremenljivk" X rang

$$L = \left(\frac{k+d}{d} \right),$$

imenujemo izraz:

$$/2.12/ \quad V(x) = \frac{N V(\hat{y}_x)}{\sigma^2}$$

kjer je $V(\hat{y}_x)$ disperzija ocenjene vrednosti lastnosti y v točki x

$$\begin{aligned} V(\hat{y}_x) &= E [(\hat{y}_x - \eta_x) (\hat{y}_x - \eta_x)^T] = \\ &= X^{T[d]} E [(b - \beta) (b - \beta)^T] x^{[d]} = \\ &= X^{T[d]} [(X^T X)]^{-1} x^{[d]} \sigma^2 \end{aligned}$$

Disperzijska funkcija je torej standardizirana mera natančnosti, s katero lahko eksperimentalna shema D aproksimira fizikalne lastnosti na množici možnih receptur. Je enolično definirana za vsako k-dimenzionalno shemo reda d in je odvisna le od x_1, x_2, \dots, x_k ter disperzije eksperimentalne napake σ^2 . (/2/ stran 207).

Posebno uporabne so sheme, pri katerih je disperzijska funkcija samo funkcija oddaljenosti od centra sheme / ničelne recepture /

$$\rho^2 = \sum_{i=1}^k x_i^2$$

torej $V(\rho)$. Takšne sheme imenujemo vrtljive eksperimentalne sheme, ustrezno funkcijo pa sferično disperzijsko funkcijo. Grafi sferične disperzijske funkcije so krogi, krogle in hiperkrogle, odvisno pač od reda eksperimentalne sheme. Sferična disperzijska funkcija ostane nespremenjena pri rotaciji koordinatnega sistema. V praksi to pomeni, da vrtljive eksperimentalne sheme omogočajo načrtovanje poskusov tudi pri takšnih recepturah, kjer še nič ne vemo o skupnem vplivu dveh ali več komponent zmesi na določeno fizikalno lastnost.

Vrtljive eksperimentalne sheme poiščemo s pomočjo matrike momentov. Le-ta mora tudi ostati nespremenjena pri rotaciji koordinatnega sistema. Box in Hunter sta dokazala naslednji izrek: (2/ stran 209) :

I.1. Če označimo α – ti moment z izrazom

$$[1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_{12}}, \dots, k^{\alpha_k}] = N^{-1} \sum_{u=1}^N x_{1u}^{\alpha_1} x_{2u}^{\alpha_2}, \dots, x_{ku}^{\alpha_k}$$

pri čemer je $\alpha = \sum_{i=1}^k \alpha_i$, potem lahko zapišemo momente vrtljive eksperimentalne sheme reda d takole:

/2.13/

$$[1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_{12}}, \dots, k^{\alpha_k}] = \begin{cases} 0, & \text{če je ena ali več potenc liho število} \\ \lambda_\alpha \frac{\sum_{i=1}^k \alpha_i!}{2^{\alpha/2} \prod_{i=1}^k (\frac{1}{2} \alpha_i!)}, & \text{če so vsi } \alpha_i \text{ soda števila} \end{cases}$$

in so λ_α primerno izbrane konstante.

Izrek dokažemo s pomočjo sferične verjetnostne porazdelitvene funkcije, ki ima enake začetne momente do reda d, kot vrtljiva eksperimentalna shema reda d. Dokaz sam je precej dolgovezen in ga bomo zato izpustili. Kot vidimo je disperzijska funkcija sheme $V(\rho)$ funkcija $\rho = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{1/2}$ in še konstant $\lambda_0, \lambda_2, \dots, \lambda_{2d}$. Določitev vrtljive sheme reda d poteka takole:

- a/ S pomočjo /2.13/ najprej določimo matriko momentov, še nedoločeno v λ_i .
- b/ Konstante $\lambda_0, \lambda_2, \dots, \lambda_{2d}$ določimo tako, da zadoščajo hkrati disperzijski funkciji in matriki $A = (X^T X)^{-1} X^T X_1$, ki nastopa v metodi najmanjših kvadratov /stran 16/
- c/ Pri določitvi eksperimentalne sheme D iz matrike momentov skušamo zadostiti čim več zahtevam, ki smo jih našteali v začetku tega poglavja /stran 14/.

Vrnimo se spet k k-dimenzionalnim shemam drugega reda. Kot vidimo iz /2.13/ je $\lambda_0 = [0]$, $\lambda_2 = [ii]$, $\lambda_4 = [iijj]$ in $[iiii] = 3\lambda_4$ pri $i, j = 1, 2, \dots, k$. Prvi dve konstanti sta $\lambda_0 = 1$ in $\lambda_2 = 1$, tako da nam preostane nedoločena le konstanta λ_4 . Matrika momentov vrtljive sheme drugega reda ima obliko:

/2.14/

$$N^{-1} X^T X =$$

		0	1	2	...	k	11	22	...	kk	12	13	...	k-1,k
0	1													
1		1												
2			1											
...				.				0						
...					.									
...						.								
k							1							
11	1							$3\lambda_4 \lambda_4$...	λ_4				
22	1							λ_4	$3\lambda_4$...	λ_4			
...	.				0									0
...	.													
...	.													
kk	1					0	λ_4	λ_4	...	$3\lambda_4$				
12											λ_4			
13												λ_4		
...		0		0					0				.	
...														.
...														.
k-1,k														λ_4

S pomočjo inverzne matrike $N^{-1} X^T X$ dobimo še disperzijsko funkcijo za vrtljive sheme drugega reda:

$$/2.15/ \quad V(\rho) = A \left\{ 2 (k+2) \lambda_4^2 + 2\lambda_4(\lambda_4 - 1)(k+2)\rho^2 + \left[(k+1) \lambda_4 - (k-1) \right] \rho^4 \right\},$$

kjer je $A = \left\{ 2 \lambda_4 \left[(k+2) \lambda_4 - k \right] \right\}^{-1}$

Če izberemo $\lambda_4 = 1$ postane vrtljiva shema tudi ortogonalna.

Diagonalno matriko momentov dobimo spet na ta način, da izrazimo "neodvisne spremenljivke" z ortogonalnimi polinomi. Disperzijska funkcija za vrtljivo ortogonalno shemo ima enostavnejšo obliko:

/2.16/ $V(\rho) = \frac{1}{2} (k + 2 + \rho^4)$, disperzije koeficientov polinoma so:

$$\frac{NV(b_0)}{2} = \frac{1}{2} (k + 2) ; \quad \frac{NV(b_i)}{2} = 1 ;$$

$$\frac{NV(b_{ii})}{2} = \frac{1}{2} ; \quad \frac{NV(b_{ij})}{2} = 1 ;$$

$$\frac{NCov(b_0 b_{ij})}{2} = -\frac{1}{2} ;$$

ostale kovariance pa so nič.

Kot vidimo iz /2.15/, pada natančnost izračunanih koeficientov polinoma pri $\rho > 1$ zelo hitro, ne glede na izbor λ_4 . V praktično najbolj uporabnih shemah so eksperimentalne točke izbrane pri $\rho = 0$, $\rho = 1$ in še pri $\rho < 2$, zato pogosto izberemo tak λ_4 , da je $V(\rho = 0) = V(\rho = 1)$. V tabeli 2.1 so navedene vrednosti za λ_4 za najbolj pogoste dimenzije shem:

TABELA 2.1

k	2	3	4	5	6	7	8
λ_4	0,7844	0,8385	0,8704	0,8918	0,907	0,9184	0,9274

Lastnost disperzijske funkcije vrtljivih shem, da pri $\rho > 1$ zelo hitro narašča proti neskončnosti, sta uporabila Derringer in Harrington v svoji metodi optimizacije namesto omejitev za neodvisne spremenljivke. Prav zato je postala disperzijska funkcija pomembna ne le v načrtovanju poizkusov, ampak tudi pri iskanju optimalne zmesi, kot bomo videli v četrtem poglavju.

2.4. Primeri vrtljivih shem drugega reda

Omenili smo, da so pri vrtljivi shemi reda d momenti do reda $2d$ enaki momentom sferične porazdelitve. Od tod ideja, da bi lahko konstruirali vrtljive sheme s pomočjo ekviradialnih nizov točk. Niz točk imenujemo ekviradialen z radijem ρ , če se točke niza nahajajo na krogli ali hiperkrogli z radijem ρ .

Če ostanejo momenti do reda $2d$ za tak niz točk nespremenjeni ob rotaciji, ga imenujemo vrtljivi ekvidistančni niz točk reda d .

En sam niz točk še ni vrtljiva shema. Pri shemah drugega reda sicer lahko poiščemo tak vrtljiv niz točk, ki zadošča /2.13/, vendar le pri takšnih λ_4 , pri katerih postane matrika momentov singularna. Oddaljenost u -te točke od centra je $\rho^2 = \sum_{i=1}^k x_{iu}^2$; od tod dobimo:

$$\rho^2 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N \sum_{i=1}^k x_{iu}^2 = \sum_{i=1}^k [ii] = k$$

ter

$$\rho^4 = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N \left(\sum_{i=1}^k x_{iu}^2 \right)^2 = \sum_{i=1}^k [iiii] +$$

$$+ \sum_{i=1}^k \sum_{j \neq i}^k [ijji] = 3k\lambda_4 + k(k-1)\lambda_4$$

$$/2.17/ \quad \lambda_4 = \frac{k}{k+2}$$

Če vstavimo tak λ_4 v enačbe /2.15/, postane A neskončno in zato ne moremo izračunati disperzij vseh koeficientov. Izraz /2.17/ za λ_4 imenujemo zato singularna vrednost.

Vrtljive sheme drugega reda dobimo s kombinacijo dveh ali več vrtljivih ekviradialnih nizov točk. Denimo, da imamo s ekviradialnih nizov točk, kjer je v w-tem nizu n_w točk oddaljenih ρ_w od centra eksperimentalne sheme. Za sklop nizov z

$$N = \sum_{w=1}^s n_w \quad \text{točkami je}$$

$$/2.18/ \quad \lambda_4 = \frac{Nk \sum_{w=1}^s n_w \rho_w^2}{(k+2) (\sum_{w=1}^s n_w \rho_w^2)^2}$$

kar pa v splošnem ni singularna vrednost. Eksperimentalne točke v središču sheme so tudi vrtljiv niz z radiusom nič in tako lahko zapišemo vrednost za λ_4 pri najenostavnejši vrtljivi shemi z n_1 točkami v centru in n_2 točkami na hiperkrogli z radiusom ena:

$$/2.19/ \quad \lambda_4 = \frac{k(n_1 + n_2)}{(k+2)n_2}$$

Od vseh možnih ekviradialnih nizov so vrtljivi tisti, ki tvorijo oglišča pravilnih teles, katerim se da očrtati kroglja ali hiperkrogla. Ker v praksi variiramo vsaj tri komponente zmesi, si bomo ogledali tro in več dimenzionalne sheme in možne vrtljive nize točk.

Trodimenzionalni nizi točk so možni pri $N = 4$ (tetraeder), $N = 6$ (oktaeder), $N = 8$ (kocka), $N = 12$ (ikozaeder) in $N = 20$ (dodekaeder). Vrtljive sheme dobimo na več načinov in sicer:

- z dodajanjem $n_1 \geq 1$ točk v centru sheme pri ikozaedru in dodekaedru,
- s kombinacijo dveh ali več vrtljivih nizov z različnimi radiusi. Možnosti je zelo veliko, zato izberemo tiste, pri katerih je λ_4 približno enak vrednosti iz tabele 2.1.

Pri več kot treh dimenzijah so možni nizi točk pri $N = k + 1$ (k – dimenzionalna analogija tetraedru), $N = 2k$ (k – dimenzionalna analogija oktaedra) in hiperkocka pri $N = 2^k$. V štiridimenzionalnem prostoru so možni še drugačni ekviradialni vrtljivi nizi, ki pa imajo preveč točk. V običajni orientaciji koordinatnega sistema so koordinate hiperkocke $(\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)$ in k – dimenzionalnega oktaedra

$$(\pm\sqrt{k}, 0, \dots, 0), (0, \pm\sqrt{k}, 0, \dots, 0) \dots, (0, 0, \dots, \pm\sqrt{k})$$

ki jih imenujemo tudi aksialne točke, ker ležijo na koordinatnih oseh. Kadar je k veliko število, dobimo preveč eksperimentalnih točk, zato izpustimo nekaj točk hiperkocke. V splošnem ima p -ti delni niz $n_c = 2^{(k-p)}$ točk hiperkocke, navadno pa vzamemo $p = 1$. Tako smo prišli do zgradbe eksperimentalnih shem, ki jih uporabljamo v našem načrtovanju poizkusov:

N točk eksperimentalne sheme sestoji iz:

- n_c točk (2^k ali $2^{(k-1)}$ točk hiperkocke) s koordinatami $(\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)$,

- n_a točk /aksialne točke/ s koordinatami $(\pm\alpha, 0, \dots, 0)$, $(0, \pm\alpha, \dots, 0)$, ..., $(0, 0, \dots, \pm\alpha)$,
- n_0 točk v centru sheme.

Shema torej sestoji iz treh vrtljivih nizov točk z istim centrom in jo zato imenujemo centralna vrtljiva shema. Pri centralni vrtljivi shemi je:

$$\alpha = \sqrt[4]{n_c}, \quad \lambda_4 = \frac{N}{n_c + 4(1 + \sqrt{n_c})}, \quad c = \frac{N}{n_c + 2\sqrt{n_c}},$$

kjer je c konstanta v /2.3/ na strani 14. Število točk v centru dobimo iz formule za λ_4 , ki ga lahko izberemo po tabeli 2.1 ali vzamemo 1, če želimo ortogonalnost sheme.

2.5. Blokiranje poizkusov

Kot smo že omenili, običajno variramo 3-5 elementov recepture. Po pravkar opisanih eksperimentalnih shemah moramo izvesti za $k=3$ dvajset poizkusov, za $k=4$ 31 poizkusov, za $k=5$ pa 52. Število poizkusov pri ortogonalnih vrtljivih shemah je nekoliko večje in sicer 23, 36 ali 59. Toliko poizkusov ne moremo narediti v enem dnevu, ker to presega zmoglosti laboratorijev. Zato je potrebno določiti skupine poizkusov /bloke/, ki jih opravimo naenkrat. Blok je lahko skupina poizkusov, ki jih naredimo iz istega kosa kavčuka ali drugih elementov recepture. Znotraj bloka izvajamo poizkuse v slučajnem vrstnem redu.

Fizikalno lastnost, izmerjeno v u -ti eksperimentalni točki, kjer smo N točk razdelili v m blokov s po n_w točkami v w -tem bloku, zapišemo zdaj:

/2.20/

$$\eta_u = \sum_{w=1}^m \beta_{0w} z_{wu} + \sum_{i=1}^k \beta_i x_{iu} + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_{iu} x_{ju}$$

kjer je z_{wu} umetna spremenljivka, ki ima vrednost 1 za tiste točke, ki so v w -tem bloku in 0 sicer. V splošnem blokiranje eksperimentov lahko močno vpliva na izračun koeficientov polinoma. V posebnem primeru, ko uspe formirati bloke tako, da so spremenljivke z_w in polinomske spremenljivke x_i med seboj ortogonalne, blokiranje ne vpliva na izračun koeficientov in je eksperimentalna napaka omejena edino na napake znotraj blokov samih.

Da bi dobili potrebne pogoje za ortogonalnost blokov, zapišimo model /2.20/ malo drugače:

/2.21/

$$\eta_u = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_{iu} + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_{iu} x_{ju} + \sum_{w=1}^m \delta_w (z_{wu} - \bar{z}_w)$$

kjer je

$$\beta_0 = \sum_{w=1}^m \frac{n_w}{N} \beta_{0w}, \quad \delta_w = \beta_{0w} - \beta_0, \quad \bar{z}_w = \frac{n_w}{N}$$

Blokovne spremenljivke $z_{wu} - \bar{z}_w$ morajo torej biti ortogonalne na spremenljivke:

$$x_0, x_1, \dots, x_k, x_1^2, x_2^2, \dots, x_k^2, x_1 x_2, \dots, x_{k-1} x_k,$$

kar lahko zapišemo takole:

$$/2.22/ \quad \sum_{u=1}^N x_{iu}x_{ju} (z_{wu} - \bar{z}_w) = 0, \quad (i,j=0,1, \dots ,k)$$

odnosno

$$/2.23/ \quad \sum_{u=1}^N x_{iu}x_{ju} z_{wu} = \bar{z}_w \sum_{u=1}^N x_{iu}x_{ju}$$

Ker je za vsako vrtljivo shemo drugega reda $\sum_{u=1}^N x_{iu}x_{ju} = 0$

pri $i \neq j$, lahko zapišemo prvi pogoj ortogonalnega blokiranja eksperimentov:

$$/2.24/ \quad \sum_u^{n_w} x_{iu}x_{ju} = 0, \quad i \neq j, w=1,2, \dots ,k$$

kjer teče sumacija samo po točkah v w-tem bloku.

Drugi pogoj ortogonalnega blokiranja dobimo iz /2.23/ pri $i = j$. Tedaj imamo:

$$/2.25/ \quad \frac{\sum_u^{n_w} x_{iu}^2}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2} = \frac{n_w}{N}$$

kjer v števcu spet teče sumacija po u-jih, ki so v w-tem bloku. Z besedami lahko povemo drugi pogoj ortogonalnosti blokov takole: razmerje med vsoto kvadratov vseh spremenljivk v bloku in vsoto kvadratov vseh spremenljivk mora biti enako razmerju med številom točk v bloku in celotnim številom vseh eksperimentalnih točk. (/2/ stran 229).

Pogojema ortogonalnega blokiranja lahko zadostimo pri takšnih ortogonalnih shemah drugega reda, ki so sestavljene iz centralnih točk in

takšnega ekviradialnega niza drugega reda, ki ga lahko razdelimo na več vrtljivih shem prvega reda. Takrat je namreč vsota kvadratov spremenljivk v vsakem podnizu proporcionalna številu točk celotnega niza in pogojema ortogonalnega blokiranja zadostimo še s primerno izbranim številom točk v centru. Na primer: 20 oglišč dodekaedra lahko delimo v 5 podnizov, ki je vsak za sebe tetraeder. Tako lahko delimo shemo 20 točk dodekaedra s 5p centralnih točk v 5 ortogonalnih blokov s po $4+p$ točkami: tetraeder in p točk v centru pa sestavlja vrtljivo shemo prvega reda.

Pri shemah drugega reda, sestavljenih iz več vrtljivih nizov z različnimi radiusi, ne moremo vedno zadostiti pogojem vrtljivosti sheme in ortogonalnega blokiranja sheme. Sheme, ki smo jih opisali na strani 29, so sestavljene iz niza točk hiperkočke in niza aksialnih točk s centralnimi točkami, ki so vsak za sebe vrtljive sheme prvega reda. Dva ali več ortogonalnih blokov bomo dobili, če nam uspe določiti takšno število točk v centru, da bomo zadostili drugemu pogoju ortogonalnega blokiranja. Če je n_{c0} število točk v centru hiperkočke in n_{a0} število točk v centru aksialnega niza, potem lahko zapišemo drugi pogoj ortogonalnega blokiranja:

$$/2.26/ \quad \frac{2\alpha^2}{n_c} = \frac{n_a + n_{a0}}{n_c + n_{c0}}$$

oziroma

$$\alpha = \sqrt{\frac{n_c (n_a + n_{a0})}{2 (n_c + n_{c0})}}$$

Vrednost α pri vrtljivih shemah mora biti $\alpha = \sqrt[4]{n_c}$.

Skupen pogoj za ortogonalno blokiranje vrtljivih shem je torej:

$$/2.27/ \quad \frac{\sqrt{n_c}}{2} = \frac{n_c + n_{c0}}{n_c + n_{a0}}$$

Ta pogoj nam ne da za n_{a0} vedno rešitve v celih številkah, tudi za n_{c0} ne. Kjer nam ne uspe hkrati določiti celih števil za n_{a0} in n_{c0} , se odločimo za ortogonalno blokiranje sheme, ki ni več vrtljiva, in skušamo izbrati takšna števila, da so razlike med α v /2.26/ in α pri vrtljivih shemah čim manjše.

V tabeli 2.2 na strani 36 so prikazani načini blokiranja vrtljivih in skoraj vrtljivih shem, kakršne največkrat srečamo v literaturi o sestavljanju zmesi in kakršne uporabljamo tudi v Savi. Z B.1 smo označili bloke, dobljene iz nizov točk hiperkocke, z B.2 pa blok aksialnih točk. Posamezne oznake v prvi koloni pomenijo:

- n_c - število oglišč hiperkocke
- n_{b1} - število blokov dobljenih iz točk hiperkocke
- n_1 - število točk v posameznem bloku brez centralnih točk
- n_{c0} - število točk v centru, da dobimo vrtljiv ali skoraj vrtljiv niz točk hiperkocke
- n_{cb} - skupno število točk v posameznem bloku.

Aksialni blok je en sam in vsebuje sledeče točke:

- n_a - število aksialnih točk
- n_{a0} - število centralnih točk
- n_{ab} - skupno število točk aksialnega bloka

Skupno število vseh točk sheme smo označili z N. Na koncu tabele so še vrednosti α za ortogonalno blokiranje in α za vrtljive centralne sheme. Za primerjavo med blokiranimi in neblokiranimi shemami nam tabela 2.3 prikazuje nekatere osnovne vrtljive centralne sheme; posamezne oznake v tabeli 2.3 na strani 36 pomenijo naslednje:

- n_c - število točk v nizu, dobljenem iz oglišč hiperkocke
- n_a - število aksialnih točk
- n_{o1} - število centralnih točk, pri katerem ima λ_4 vrednost iz tabele 2.1 na strani 26.
- n_{o2} - število centralnih točk, potrebnih za ortogonalnost
- N_1 - skupno število točk vrtljive neortogonalne sheme
- N_2 - skupno število točk vrtljive ortogonalne sheme
- α - vrednost pri vrtljivih shemah ($\alpha = \sqrt[4]{n_c}$)
- $I\lambda_4$ - vrednost λ_4 iz tabele 2.1
- $II\lambda_4$ - vrednost λ_4 za ortogonalne sheme.

TABELA 2.2

k	2	3	4	5	$5\left(\frac{1}{2}\right)$	6	$6\left(\frac{1}{2}\right)$	7	$7\left(\frac{1}{2}\right)$
B.1									
n_c :	4	8	16	32	16	64	32	128	64
n_{b1} :	1	2	2	4	1	8	2	16	8
n_1 :	4	4	8	8	16	8	16	8	8
n_{c0} :	3	2	2	2	6	1	4	1	1
n_{cb} :	7	6	10	10	22	9	20	9	9
B.2									
n_a :	4	6	8	10	10	12	12	14	14
n_{a0} :	3	2	2	4	1	6	2	11	4
n_{ab} :	7	8	10	14	11	18	14	25	18
N:	14	20	30	54	33	90	54	169	80
α_p :	1,414	1,633	2,000	2,366	2,000	2,828	2,366	3,364	2,828
α_r :	1,414	1,682	2,000	2,378	2,000	2,828	2,378	3,333	2,828

TABELA 2.3

n_c :	4	8	16	32	16	64	32	128	64
n_a :	4	6	8	10	10	12	12	14	14
n_{01} :	5	6	7	10	6	15	9	21	14
n_{02} :	8	9	12	17	10	24	15	35	22
N_1 :	13	20	31	52	32	91	53	163	92
N_2 :	16	23	36	59	36	100	59	177	100
α :	1,414	1,682	2,000	2,378	2,000	2,828	2,378	3,364	2,828
$I\lambda_4$:	0,81	0,86	0,86	0,89	0,89	0,91	0,90	0,92	0,92
$II\lambda_4$:	1,00	0,99	1,00	1,01	1,00	1,00	1,01	1,00	1,00

III. METODE LINEARNEGA PROGRAMIRANJA

Ena od možnih definicij problema optimizacije nelinearne namenske funkcije pri nelinearnih omejitvah je naslednja (/1/ stran 592):

Iščemo

$$/3.1/ \quad \max c(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

pri pogojih

$$/3.2/ \quad A_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq 0 \quad i=1, 2, \dots, m$$

$$/3.3/ \quad x_j \geq 0 \quad j=1, 2, \dots, n$$

Katerakoliizmed funkcij A_i in c ja lahko linearna in formalno vključuje ta definicija tudi linearne programe, nelinearne programe z linearnimi omejitvami in nelinearne programe z linearno namensko funkcijo. Pogoj /3.3/ običajno zapišemo v tej obliki zaradi poenostavitve, s primerno transformacijo neodvisnih spremenljivk je možno namreč vsak program, pri katerem so x_j poljubni, prevesti v obliko /3.1/, /3.2/ in /3.3/. Standardizirane spremenljivke v eksperimentalnih shemah /2.1/ imajo za definicijsko območje intervale $(-\alpha, +\alpha)$, vendar jih lahko z enostavno linearno transformacijo preslikamo v nove, ki zadoščajo /3.3/. V definiciji nelinearnega programa za določitev optimalne zmesi /3.1/, /3.2/ in /3.3/ so funkcije A_i polinomi drugega reda. Namenska funkcija c je bodisi linearna, bodisi polinom drugega reda ali pa bolj komplicirana Harringtonova funkcija, ki jo bomo srečali v naslednjem poglavju.

Kot v teoriji linearne programiranja nas tudi v teoriji nelinearnega programiranja najprej zanima množica možnih rešitev, definirana

s pogojev /3.2/ in /3.3/. Kot bomo videli kasneje, je potrební pogoj za eksistenco optimalne rešitve nelinearnega programa ta, da je množica možnih rešitev konveksna, A_i pa na danih intervalih konveksne funkcije.

D.3.1. Funkcija realnih spremenljivk je konveksna, če za poljubni točki $x \neq y$ in pri vsakem $p \in [0,1]$ velja

$$pA(x_1, x_2, \dots, x_n) + (1-p)A(y_1, y_2, \dots, y_n) \geq A(px_1 + (1-p)y_1, px_2 + (1-p)y_2, \dots, px_n + (1-p)y_n)$$

in strogo konveksna pri znaku ">".

Če je funkcija odvedljiva, lahko zapišemo potrební pogoj za to, da je funkcija konveksna, takole:

/3.4/ Če velja za poljubni točki $x \neq y$ neenakost:

$$A(y) \geq A(x) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial a(x)}{\partial x_j} (y_j - x_j)$$

potem je funkcija $A(x_1, x_2, \dots, x_n)$ konveksna.

V teoriji nelinearnega programiranja poznamo več metod za določevanje optimalne rešitve in vsaka metoda se opira na kakšno posebno lastnost bodisi namenske funkcije, bodisi funkcij A_i . Splošne zahteve, ki jim morajo zadoščati funkcije A_i , so naslednje (/1/ stran 593):

/3.5/ Vsaka funkcija A_i mora biti enolična, omejena in konveksna funkcija n spremenljivk pri vseh argumentih (x_1, x_2, \dots, x_n) , ki zadoščajo pogojev /3.2/ in /3.3/.

/3.6/ Vsak parcialni odvod $\partial A_i(x)/\partial x_j$ mora biti zvezna funkcija vseh argumentov, ki zadoščajo pogoju /3.2/ in /3.3/.

/3.7/ Eksistirati mora vsaj ena takšna točka $x^0 \geq 0$, da velja
 $A_i(x^0) < 0$ za $i=1,2, \dots, m$.

Čeprav že /3.5/ implicitno vsebuje zahtevo, da so funkcije A_i zvezne, zahtevamo še več, da so tudi parcialni odvodi zvezne funkcije. Prva zahteva nam pove, da je množica možnih rešitev konveksna, druga zahteva služi v večini algoritmov za določanje smeri naraščanja namenske funkcije, tretja pa nam zagotavlja začetno možno rešitev, kar tudi zahtevajo vsi algoritmi. Pokažimo, da je množica /3.2/ res konveksna množica. Kot vemo iz definicije konveksnih množic, mora biti vsaka konveksna kombinacija

$$px + (1 - p)y \quad 0 \leq p \leq 1$$

v množici, če sta x in y elementa konveksne množice.

Torej velja za vsak i

$$A_i(x) \leq 0 \quad \text{in} \quad A_i(y) \leq 0$$

Iz definicije D.3.1 dobimo:

$$\begin{aligned} A_i(px_1 + (1 - p)y_1, \dots, px_n + (1 - p)y_n) &\leq \\ &\leq pA(x_1, \dots, x_n) + (1 - p)A(y_1, \dots, y_n) \leq 0 \quad p \in (0,1) \end{aligned}$$

Prvi in drugi člen vsote sta manjša od 0, zato je tudi leva stran manjša od 0, torej je vsaka konveksna kombinacija možnih rešitev spet možna rešitev.

Zahtevi /3.6/ in /3.7/ skupaj zagotavljata, da je množica možnih rešitev neskončna.

Definicija D.3.1 je v praktičnem preverjanju konveksnosti funkcij neprimerna. V mnogih primerih lahko ugotovimo, da je $A_i(x)$ konveksna, če je izpolnjena ena izmed naslednjih možnosti (/1/ stran 594):

- A. funkcija je vsota konveksnih funkcij npr. $3x^2 - 6x$
- B. funkcija je negativna konkavna funkcija npr. $-(4y - 2y^2)$
- C. funkcija je monotono naraščajoča konveksna funkcija konkavne funkcije npr. a^{x^2} pri $a > 0$, kjer je $a(z) = a^z$ monotono naraščajoča in konveksna pri $a > 0$ in $z = x^2$ tudi konveksna
- D. monotono padajoča konveksna funkcija z argumentom, ki je konkavna funkcija
- E. funkcija je konveksna funkcija linearne funkcije.

Funkcija ene spremenljivke $a(x)$ je konveksna natanko takrat, kadar je $\frac{d^2a(x)}{dx^2} \geq 0$ pri vsakem x . Pri funkcijah več spremenljivk velja podoben izrek, ki pravi, da je funkcija konveksna natanko takrat, kadar je matrika parcialnih odvodov drugega reda pozitivno semidefinitna (ima nenegativno determinanto).

Tudi za namensko funkcijo velja nekaj splošnih zahtev in sicer (/1/ stran 594):

/3.8/ $c(x)$ naj bo enolična in omejena funkcija v vseh možnih točkah

/3.9/ tudi vsak parcialni odvod $\frac{\partial c(x)}{\partial x_j}$ naj bo enolična, omejena in zvezna funkcija

/3.10/ $c(x)$ naj ima končen maksimum \bar{c} na množici možnih točk

/3.11/ $c(x)$ naj bo konkavna funkcija / negativna konveksna funkcija je konkavna funkcija/.

Naštete zahteve nam zagotavljajo, da (/1/ stran 594):

/3.12/ obstaja vsaj ena možna rešitev \bar{x} taka, da je $c(\bar{x}) = \bar{c}$

/3.13/ če je $c(x)$ strogo konkavna, je \bar{x} natanko ena sama točka iz množice možnih točk

/3.14/ če je \bar{x} točka na robu množice možnih rešitev, je \bar{x} globalni maksimum.

Lastnosti rešitve ostanejo iste tudi pri nekoliko bolj splošnih zahtevah za $c(x)$ in $A_i(x)$. Toda zahteva po konveksnosti množice možnih rešitev je bistvena lastnost rešitve /3.14/; v nasprotnem primeru lokalni optimum ni vedno tudi globalni optimum, četudi $c(x)$ zadošča zahtevam /3.8/ do /3.11/. Prav to pa je največja težava pri iskanju optimalnih zmesi. Polinomi drugega reda, ki določajo množico možnih rešitev, so konveksne funkcije, če je matrika parcialnih odvodov drugega reda pozitivno semidefinitna – to pa največkrat ni. V petem poglavju bomo opisali popravke metode nelinearnega programiranja, ki omogočajo določitev približnega maksimuma v vsakem primeru, tudi takrat, kadar ni množica možnih rešitev konveksna. Tudi namenska funkcija /1.1/ ni vedno konkavna; na primer pri optimizaciji izbrane fizikalne lastnosti gume, aproksimirane s polinomom, ki ni konkavna funkcija. Omenjeni popravek algoritma nam dobro služi tudi v tem primeru.

Osnovna ideja vseh algoritmov nelinearnega programiranja je naslednja:

- v k-tem koraku imamo neko možno rešitev x^k in pogledamo, če to morda ni že optimalna točka,
- če je možno $c(x^k)$ še povečati, potem določimo neko smer, v kateri je $c(x)$ še možno povečati. Tako poiščemo novo točko x^{k+1} in z njo novo boljšo rešitev.

3.1. Metoda konveksnih kombinacij

Predno bomo obravnavali algoritme za reševanje nelinearnega programa z nelinearnimi omejitvami /3.1/ do /3.3/, si pogledjmo naslednji enostavnejši nelinearni program (/1/ stran 580):

$$/3.15/ \quad \max c(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

pri omejitvah

$$/3.16/ \quad \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j + s_i = b_i \quad i = 1, 2, \dots, m$$

$$/3.17/ \quad x_j \geq 0, \quad s_i \geq 0 \quad j = 1, 2, \dots, n$$

Namenska funkcija $c(x)$ naj zadošča zahtevam /3.8/ do /3.11/. Ker smo definirali nelinearni program z linearnimi omejitvami, je množica možnih rešitev konveksna. Začetno bazno rešitev dobimo ob predpostavki

$$/3.18/ \quad b_i \geq 0 \quad i = 1, 2, \dots, m$$

in se glasi $x_j = 0$ in $s_i = b_i$.

Navedena definicija nelinearnega programa z linearnimi omejitvami vsebuje kot poseben primer tudi kvadratni program. Iz teorije kvadratičnega programiranja vemo, da je optimalna rešitev lahko v eni izmed naslednjih možnih točk:

- nekje znotraj množice možnih rešitev,
- na robu množice možnih rešitev, toda ne v ekstremni točki,
- v ekstremni točki.

Ker torej optimum ni vedno v ekstremni točki, je zato pri optimalni rešitvi več kot m pozitivnih x_j . Lastnosti optimalne rešitve bomo podrobneje obravnavali v splošnejšem primeru nelinearnega programa z nelinearnimi omejitvami. V tem enostavnejšem nelinearnem programu si raje poglejmo glavne korake iterativne metode, ki nam bodo služili v nekoliko dopoljnjeni obliki tudi pri splošnejših problemih.

Metoda konveksnih kombinacij je zelo uporabna iterativna metoda za reševanje nelinearnih programov z linearnimi omejitvami. Sestavljena je iz naslednjih korakov:

Korak 1. Izberemo poljubno možno rešitev x^0 ;
ob privzetku /3.18/ je to kar $s_i = b_i$.

Korak 2.a. V k-ti iteraciji določimo vektor smeri naraščanja namenske funkcije d^k .

- b. Poiščemo optimalno širino koraka t^k v smereh naraščanja namenske funkcije d^k , pri katerem ima namenska funkcija največjo vrednost. Če je optimalna širina koraka $t^k = 0$, prekinemo z delom, ker smo našli optimalno rešitev. V nasprotnem primeru nadaljujemo s korakom 3.

Korak 3. Novo izboljšano možno rešitev dobimo zakole:

$$x_j^{k+1} = x_j^k + t^k d_j^k \quad j = 1, 2, \dots, n$$

Delo nadaljujemo s korakom 2.

Različne metode se razlikujejo med seboj pravzaprav samo v koraku 2. Metoda konveksnih kombinacij izračuna optimalne smeri naraščanja namenske funkcije s pomočjo pomožnega linearnega programa. Pomožni linearni program dobimo tako, da nadomestimo nelinearno namensko funkcijo s primerno izbranim linearnim približkom. Ker je namenska funkcija zvezno odvedljiva, moremo vrednost $c(x)$ v bližini točke x^k aproksimirati s pomočjo Taylorjeve vrste:

$$/3.19/ \quad c(z) \doteq c(x^k) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial c(x^k)}{\partial x_j} (z_j - x_j^k)$$

Denimo, da smo našli takšno možno točko \bar{z} , da je vsota na levi /3.19/ maksimalna; za točko \bar{z} tedaj velja:

$$/3.20/ \quad \sum_{j=1}^n \frac{\partial c(x^k)}{\partial x_j} \bar{z}_j > \sum_{j=1}^n \frac{\partial c(x^k)}{\partial x_j} x_j^k$$

Prav verjetno je, da \bar{z} ni v neposredni okolici točke x^k in je zato aproksimacija /3.19/ slaba. Dejansko je $c(\bar{z})$ lahko celo manjši od $c(x^k)$. Toda zaradi zveznosti namenske funkcije in njenih parcialnih odvodov obstaja konveksna kombinacija točk x^k in \bar{z} , v kateri ima namenska funkcija izboljšano vrednost:

$$/3.21/ \quad c(x^{k+1}) \geq c(x^k)$$

kjer je $x_j^{k+1} = (1 - t)x_j^k + t\bar{z}_j$ $j = 1, 2, \dots, n$

$$0 \leq t \leq 1$$

Zdaj že lahko opišemo korak 2 pri metodi konveksnih kombinacij:

- v točki x^k izračunamo vse parcialne odvode namenske funkcije,
- rešimo linearni program, ki je sestavljen takole:

/3.22/ Iščemo
$$\max \sum_{j=1}^n \frac{\partial c(x^k)}{\partial x_j} z_j$$

pri originalnih omejitvah

/3.23/
$$\sum_{j=1}^n a_{ij} z_j + s_i = b_i$$

- vektor smeri naraščanja namenske funkcije je potem

/3.24/
$$d^k = \bar{z} - x^k$$

kjer je \bar{z} rešitev linearnega programa. Z iteracijami prenehamo, ko neenakost v /3.20/ postane enakost.

- poiščemo takšno število $0 \leq t \leq 1$, da ima namenska funkcija največjo vrednost v točki

/3.25/
$$x^{k+1} = x^k + td^k$$

To je nova boljša možna rešitev.

Metoda konveksnih kombinacij se močno opira na dejstvo, da so omejitve linearne funkcije. Povrnimo se zopet k nelinearnim programom z nelinearnimi omejitvami. Zaradi nelinearnih omejitev nastanejo težave pri določanju smeri, v katerih namenska funkcija raste. Različne metode se razlikujejo po tem, kako preprečujejo, da bi v k-ti iteraciji dosegla možna rešitev rob konveksne množice možnih rešitev.

V knjigi H.M.Wagnerja "Principles of operations research" /1/, so opisane tri metode, ki vsaka na svoj način določa možne smeri povečanja namenske funkcije. Prvo (Method of feasible directions, /1/ stran 596) si bomo natančneje ogledali v nadaljevanju tega poglavja. Druga metoda (Penalty function approach, /1/ stran 609) vključuje vse omejitve /3.2/ in /3.3/ v namensko funkcijo in išče maksimum tako dobljene sestavljene funkcije:

$$/3.26/ \quad \max c\left(\frac{x}{r}\right) = c(x) + r \sum_{i=1}^M \frac{1}{A_i(x)} \quad r > 0$$

po vseh možnih x . Pri tem smo v $A_i(x)$ vključili skupaj /3.2/ in /3.3/, zato je $M = n + m$. Kot vidimo, ne more nobena izmed možnih rešitev doseči roba množice možnih rešitev in zato lahko izračunamo smeri povečanja, kot da bi omejitev ne bilo. Algoritem se imenuje SUMT (sequential unconstrained maximization technique).

Tretja metoda (Generalized programming algoritem, /1/ stran 613) uporablja mrežo točk, s pomočjo katere aproksimira množico omejitev s konveksnim poliedrom. Tako dobljeni nelinearni program z linearnimi omejitvami lahko rešimo z metodo konveksnih kombinacij.

Pri vseh metodah konvergira zaporedje $c(x^k)$ monotono proti optimalni vrednosti \bar{c} in vsaj podzaporedje možnih rešitev x^k konvergira k optimalni rešitvi \bar{x} (/1/ stran 595). Če je optimalna rešitev ena sama, potem je to kar limita zaporedja x^k . V splošnem torej ni možno rešiti nelinearnega programa z nelinearnimi omejitvami v končnem številu korakov, zato je važna hitrost konvergence zaporedja možnih rešitev in je dejansko število korakov odvisno le še od predpisane natančnosti, pri kateri smo zadovoljni s približkom.

3.2. Metoda možnih smeri povečanja namenske funkcije

V prejšnjem oddelku smo videli, da nastopi glavna težava pri iskanju nove, boljše rešitve takrat, ko pridemo na rob konveksne množice možnih rešitev. Metoda možnih smeri se spopade s to težavo na ta način, da v točki x^k , ki pride na rob, vzame linearne približke za funkcije omejitev in nato določi možne smeri k točkam, ki so znotraj množice možnih rešitev.

Označimo z vektorjem $d^T = (d_1, d_2, \dots, d_n)$ možno smer, v kateri iščemo boljšo rešitev. Ker je namenska funkcija zvezno odvedljiva funkcija, se bo vrednost $c(x^k)$ v k-ti iteraciji povečala v smeri vektorja d takrat, kadar bo

$$/3.27/ \quad \sum_{j=1}^n \frac{\partial c(x^k)}{\partial x_j} d_j > 0$$

zato moremo neenakost /3.27/ vzeti za test, katera od možnih smeri d_j lahko poveča vrednost namenske funkcije.

Kot smo videli že v algoritmu SUMT, največkrat združimo omejitve /3.2/ in /3.3/ v enoten zapis

$$/3.28/ \quad A_i(x) \leq 0 \quad i = 1, 2, \dots, M$$

Linearna aproksimacija funkcij A_i v točki $(x^k + d)$ je

$$/3.29/ \quad A_i(x_1^k + d_1, x_2^k + d_2, \dots, x_n^k + d_n) \approx \\ \approx A_i(x^k) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial A_i(x^k)}{\partial x_j} d_j$$

kjer smo upoštevali le prva dva člena Taylorjeve vrste. Pogledati moramo naslednji dve možnosti: x^k je znotraj množice možnih rešitev in x^k je na robu.

V prvem primeru je $A_i(x^k) < 0$ pri vsakem i . Desna stran v /3.29/ je striktno negativna, če so vsi $d_j = 0$. Vendar tudi v primeru, ko vsi d_j niso enaki nič, obstaja takšno število $t > 0$, da leži točka $(x + td)$ znotraj množice možnih rešitev pri poljubnih smereh d . V drugem primeru je točka x^k na robu množice možnih rešitev, to pomeni, da je pri nekem i $A_i(x^k) = 0$. V tem primeru obstaja takšno število $t > 0$, da točka $(x^k + td)$ zadošča i -ti omejitvi samo, če smeri d_j naredijo desno stran /3.29/ strogo negativno.

Napravimo povzetek. Smeri d_j vodijo k novi možni rešitvi $(x^k + td)$, ki poveča vrednost funkcije $c(x)$ takrat, kadar je vsota /3.27/ strogo pozitivna in desna stran /3.29/ strogo negativna. Če ne obstaja niti ena takšna smer d_j , potem je x^k stacionarna točka na robu omejitev. Najboljši izbor za smeri d_j poiščemo s pomočjo linearnega programa, formuliranega takole:

$$/3.30/ \quad \max x_0$$

pri pogojih

$$/3.31/ \quad x_0 \leq \sum_{j=1}^n \frac{\partial c(x^k)}{\partial x_j} d_j \quad \text{ali} \quad x_0 - \sum_{j=1}^n \frac{\partial c(x^k)}{\partial x_j} d_j \leq 0$$

ter

$$/3.32/ \quad A_i(x^k) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial A_i(x^k)}{\partial x_j} d_j \leq -x_0 \quad \text{ali}$$

$$x_0 + \sum_{j=1}^n \frac{\partial A_i(x^k)}{\partial x_j} d_j \leq -A_i(x^k) \quad i = 1, 2, \dots, M$$

/3.33/ x_0 in d_j sta poljubnega predznaka.

Iz /3.27/ in /3.29/ sledi, da je optimalni x_0 vedno pozitivno število, dokler x^k ne postane stacionarna točka na robu množice možnih rešitev. Formulacija linearnega programa /3.30/ do /3.33/ še ni popolna, ker se lahko zgodi, da postane x_0 neskončno velik. Spomnimo se, da smo vključili v omejitve $A_i(x) \leq 0$ tudi zahteve $x_j \geq 0$, zato nam te omejitve že predstavljajo spodnjo mejo za d_j , namreč kar $-x_j^k$ pri $x_0 \geq 0$. Naraščanje x_0 v neskončnost bomo preprečili, če postavimo še zgornjo mejo za d_j . To lahko naredimo na različne načine, najenostavneje pa kar takole:

$$/3.34/ \quad d_j < b \quad i = 1, 2, \dots, n$$

kjer je b poljubno izbrano pozitivno število (na primer kar 1). Linearni program /3.30/ do /3.34/ še ni primeren za reševanje po simpleks metodi, ker so smeri d_j lahko še poljubnega predznaka. Napravimo še enostavno linearno transformacijo

$$/3.35/ \quad z_j = d_j + x_j^k$$

in dobimo linearni program z $m+1$ omejitvami in n nenegativnimi, navzgor omejenimi spremenljivkami z_j , ki zadoščajo pogojem

$$0 \leq z_j \leq b + x_j^k \quad j = 1, 2, \dots, n$$

En pogoj dobimo iz /3.31/, izmed $m+n$ neenačb $A_i(x) \leq 0$ pride v poštev le tistih m neenačb, ki so v originalnem programu nelinearne /3.2/, skupaj torej $m+1$. Tako spremenjen linearni program rešimo po simpleks metodi in dobimo možne smeri, v katerih namenska funkcija najhitreje narašča. Novo rešitev dobimo tako, da poiščemo še širino koraka t :

$$/3.36/ \quad x^{k+1} = x^k + td^k$$

Enako kot pri metodi konveksnih kombinacij dobimo optimalno širino koraka iz pogoja, da mora biti vrednost $c(x^k + td^k)$ maksimalna po vseh možnih točkah, ki ležijo v izbranih smereh d_j .

Celotna procedura algoritma je naslednja:

Korak 1: Izberimo si neko začetno možno rešitev x^0 .

Korak 2: V vsaki iteraciji najprej izračunamo vse parcialne odvode x^k in sestavimo linearni program. Če je rešitev linearnega programa $x_0 = 0$ oziroma manjša od neke predpisane vrednosti, prekinemo z delom, ker smo našli optimalno rešitev. V nasprotnem primeru nadaljujemo s korakom 3.

Korak 3: Poiščemo optimalno širino koraka t in izračunamo novo možno rešitev $x^{k+1} = x^k + td^k$. S to novo rešitvijo se vrnemo v korak 2.

Konvergenco metode možnih smeri lahko pospešimo tako, da vzamemo pri razvoju funkcije $c(x)$ v Taylorjevo vrsto še člene s parcialnimi odvodi drugega reda in jih upoštevamo v /3.31/. Nove smeri nam da rešitev kvadratnega programa. Vendar je to le bolj teoretična možnost, posebno še,

če imamo na voljo računalnik, kjer tudi večje število iteracij lahko izračunamo v zelo kratkem času.

3.3. Teoretične lastnosti optimalne rešitve

Poglejmo si nekaj izrekov, potrebnih in zadostnih pogojev za to, da je neka točka optimalna rešitev nelinearnega programa z nelinearnimi omejitvami. Pogoji optimalnosti nam:

1. dajo numerične algoritme za testiranje optimalnosti predlagane rešitve,
2. dajo informacijo o stabilnosti rešitve,
3. predlagajo nove algoritmične metode za iskanje optimalne rešitve.

Naj bo $x^k = \bar{x}$ predlagana optimalna rešitev nelinearnega programa. Takrat je seveda x_0 enako 0. Napišimo za ta primer dualni linearni program k linearnemu programu /3.30/ do /3.33/ (/1/ stran 600).

$$/3.37/ \text{ Iščemo } \min - \sum_{i=1}^M A_i(\bar{x}) y_i$$

pri pogojih

$$/3.38/ \quad \sum_{i=0}^M y_i = 1$$

$$/3.39/ \quad -\frac{\partial c(\bar{x})}{\partial x_j} y_0 + \sum_{i=0}^M \frac{\partial A_i(\bar{x})}{\partial x_j} y_i = 0 \quad \begin{array}{l} j=1,2, \dots, n \\ i=1,2, \dots, M \end{array}$$

$$/3.40/ \quad y_i \geq 0$$

S pomočjo tega dualnega programa lahko napišemo Kuhn-Tuckerjeve pogoje za optimalnost predlagane rešitve:

Kuhn-Tuckerjev izrek: Če funkcije $A_i(x)$ in $c(x)$ zadoščajo zahtevam /3.5/ do /3.11/ z začetka tega poglavja, je točka \bar{x} optimalna takrat in samo takrat, kadar velja:

$$/3.41/ \quad A_i(x) \leq 0 \quad i=1,2, \dots, M=n+m$$

in obstajajo takšna števila $\bar{u}_i > 0$, da velja

$$/3.42/ \quad A_i(\bar{x})\bar{u}_i = 0 \quad \text{in}$$

$$/3.43/ \quad \frac{\partial c(\bar{x})}{\partial x_j} - \sum_{i=1}^M \frac{\partial A_i(\bar{x})}{\partial x_j} \bar{u}_i = 0 \quad j=1,2, \dots, n$$

kjer je $\bar{u}_i = \frac{\bar{y}_i}{\bar{y}_0}$ in \bar{y}_i zadoščajo dualnemu linearnemu programu /3.37/ do /3.40/.

Pogoj /3.41/ nam zagotavlja samo to, da je \bar{x} možna točka, pogoja /3.42/ in /3.43/ pa dobimo direktno iz dualnega programa z deljenjem z $\bar{y}_0 > 0$ oziroma z $(-\bar{y}_0)$. Znano je, da ostanejo pogoji /3.41/, /3.42/ in /3.43/ zadostni za to, da je \bar{x} optimalna rešitev tudi pri bolj splošnih zahtevah za funkcije $A_i(x)$ in $c(x)$. Dovolj je le, da določajo funkcije $A_i(x)$ konveksno množico in da je lokalni maksimum funkcije $c(x)$ tudi globalni maksimum na množici možnih rešitev.

Iz dualnega linearnega programa dobimo tudi Johnove potrebne pogoje za to, da je \bar{x} optimalna rešitev. Le-ti se glasijo (/1/ stran 601):

$$/3.44/ \quad A_i(\bar{x})\bar{y}_i = 0 \quad i=1,2, \dots, M$$

$$/3.45/ \quad \frac{\partial c(\bar{x})}{\partial x_j} \bar{y}_0 - \sum_{i=1}^M \frac{\partial A_i(\bar{x})}{\partial x_j} \bar{y}_i = 0 \quad j=1,2, \dots, n$$

Skupaj z /3.41/ ostanejo Johnovi pogoji potrebni za to, da je \bar{x} optimum, v zelo splošnih pogojih. Oblika funkcij je lahko poljubna, zahtevamo le končen maksimum za $c(x)$ na množici možnih rešitev in odvode prvega reda za vse funkcije.

Kuhn-Tuckerjevi pogoji nam služijo predvsem za preverjanje optimalnosti predlagane rešitve, čeprav bi z njimi lahko tudi iskali optimalno rešitev. Toda že pri manjših programih naletimo pri iskanju optimuma direktno iz Kuhn-Tuckerjevih pogojev na hude računske težave. Možnost iskanja optimalne rešitve in stabilitetno analizo nelinearnega programa nam omogoča Lagrangeva funkcija.

3.4. Lagrangeva funkcija in njena sedlasta točka

Potrebni in zadostni pogoj za optimalnost predlagane rešitve lahko izrazimo tudi s pomočjo Lagrangeve funkcije, ki jo definiramo takole (/1/ stran 602):

$$/3.46/ \quad L(x, u) = c(x) - \sum_{i=1}^M A_i(x) \cdot u_i$$

Števila u_i se imenujejo Lagrangevi multiplikatorji. Sedlasta točka Lagrangeve funkcije se imenuje par točk $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n)$ in $(\bar{u}_1, \bar{u}_2, \dots, \bar{u}_M)$, kjer so vsi $\bar{u}_i > 0$, pri katerem velja neenakost:

$$/3.47/ \quad L(x, \bar{u}) \leq L(\bar{x}, \bar{u}) \leq L(\bar{x}, u)$$

za poljubno točko (x_1, x_2, \dots, x_n) in nenegativne (u_1, u_2, \dots, u_M) . Dokazano je, da je dvojica vektorjev \bar{x} in $\bar{u} > 0$, ki zadošča pogojem optimalnosti /3.41/, /3.42/ in /3.43/, sedlasta točka Lagrangeve funkcije in obratno. Od tod dobimo:

Lagrangev pogoj optimalnosti: Če funkcije $A_i(x)$ in $c(x)$ zadoščajo zahtevam /3.5/ do /3.11/, je točka \bar{x} optimalna takrat in samo takrat, kadar eksistira točka $\bar{u} > 0$ taka, da je dvojica (\bar{x}, \bar{u}) sedlasta točka $L(x, u)$ in je maksimalna vrednost namenske funkcije enaka $c(\bar{x}) = L(\bar{x}, \bar{u})$.

Pri bolj splošnih funkcijah $A_i(x)$ in $c(x)$ je Lagrangeva sedlasta točka samo zadostni pogoj za optimalnost predlagane rešitve. Ker v sedlasti točki velja $L(\bar{x}, \bar{u}) = c(\bar{x})$, lahko merimo stabilnost rešitve iz vpliva spremembe na Lagrangevi funkciji $L(x, u)$. Na primer: če spremenimo i -to omejitvev $A_i(x) \leq 0$ v $A_i(x) \leq \varepsilon$, kjer je ε zelo majhno pozitivno število, bo optimalna vrednost $c(x)$ narastla približno za vrednost $\varepsilon \bar{u}_i$. Lagrangevi multiplikatorji nam torej dajo informacijo o stabilnosti rešitve v njeni dovolj majhni okolici.

Lagrangevo funkcijo uporabljajo tudi mnogi drugi algoritmi nelinearnega programiranja. Enega izmed njih smo že omenili (SUMT), vendar ni naš namen prikazovanje različnih metod nelinearnega programiranja. Preostane nam še neka pomembna vloga Lagrangeve funkcije, ki je nikakor ne smemo izpustiti.

3.5. Dualnost

K nelinearnemu programu /1.1/ do /1.3/ definiramo dualni nelinearni program s pomočjo Lagrangeve funkcije takole:

Iščemo točki x in $u > 0$, da velja:

$$/3.48/ \quad \min L(x, u)$$

pri pogoju

$$/3.49/ \quad \frac{\partial c(x)}{\partial x_j} - \sum_{i=1}^M \frac{\partial A_i(x)}{\partial x_j} u_i = 0 \quad j=1,2, \dots, n$$

Možno je dokazati naslednji izrek (/1/ stran 604):

Dualni izrek nelinearnega programiranja. Funkcije $A_i(x)$ in $c(x)$ naj zadoščajo pogojem /3.5/ do /3.11/. Tedaj velja:

1. Če je \bar{x} optimalna rešitev nelinearnega programa, potem eksistirajo takšna števila $\bar{u} \geq 0$, da je dvojica (\bar{x}, \bar{u}) rešitev dualnega programa /3.48/ in /3.49/. Če je x možna točka originalnega programa in sta x in u možni točki dualnega programa, potem je $c(x) \leq L(x, u)$ in velja enakost samo za optimalno dvojico (\bar{x}, \bar{u}) .
2. Če je par (\bar{x}, \bar{u}) rešitev dualnega programa /3.48/ in /3.49/ in je $A_i(\bar{x}) \leq 0$ pri vsakem $i=1,2, \dots, M$ ter je bodisi $c(x)$ strogo konkavna, bodisi obstaja tak k , da je $A_k(x)$ strogo konveksna in je $\bar{u}_k > 0$, potem je \bar{x} optimalna rešitev originalnega nelinearnega programa z optimalno vrednostjo namenske funkcije $c(\bar{x}) = L(\bar{x}, \bar{u})$.

Kot vidimo, je namenska funkcija dualnega nelinearnega programa mnogo bolj komplicirana kot pri dualnem programu linearnega programiranja. Po definiciji Lagrangeve funkcije vsebuje namreč namenska funkcija dualnega nelinearnega programa tudi funkcijo $c(x)$ primarnega programa. Kljub temu imata dualni program in dualni izrek nelinearnega programiranja veliko uporabno vrednost.

IV. HARRINGTON – DERRINGERJEVA NAMENSKA FUNKCIJA

V uvodu smo že omenili, da poznamo več vrst namenskih funkcij. V najstarejših člankih o optimizaciji receptur srečamo največkrat problem iskanja najcenejše zmesi. Ker je v tem primeru namenska funkcija linearna, so prvotno definirali mešalni problem kot problem linearnega programiranja. Tako dobljene optimalne recepture so bile največkrat neuporabne, in sicer iz naslednjih vzrokov:

- linearni model premalo natančno opisuje odvisnosti fizikalnih količin od sestavin zmesi,
- najcenejša receptura ima v večini primerov zelo slabe vrednosti pomembnih fizikalnih količin, ker so navadno najdražje pač tiste sestavine zmesi, ki povečujejo kvaliteto zmesi.

Uporaba elektronskih računalnikov je najprej omogočila opisovanje odvisnosti fizikalnih lastnosti zmesi od posameznih komponent zmesi z ustrežnejšim, največkrat kvadratičnim modelom. Zadovoljiva izbira modela je omogočila grafično prikazovanje lastnosti zmesi v odvisnosti od dveh, največ treh komponent, vprašanje optimizacijskih metod pa je ostalo nezadovoljivo rešeno še do danes. V tehnično zelo dobro opremljenih laboratorijih so dosegli dobre rezultate s pomočjo analognih in hibridnih računalnikov. Iskanje novih tehnologij v proizvodnji gume je zahtevalo drugačno namensko funkcijo; poleg cene zmesi srečamo zdaj kot namensko funkcijo skoraj vse fizikalne lastnosti zmesi. Drage elektronske naprave v laboratorijih, povezane in krmiljene z elektronskim računalnikom, res omogočajo natančno merjenje fizikalnih lastnosti in izbor željene kombinacije sestavin zmesi, vendar so zaradi svoje cene dostopne samo največjim proizvajalcem gumenih izdelkov. Zato je ubrala optimizacija zmesi drugačno pot s pomočjo digitalnih računalnikov.

Avtorji Hartman, Beaumont, Chamberlain in Nicolson so našli zadovoljive računalniške metode za optimizacijo izbrane fizikalne količine ali cene pri danem sistemu omejitev za druge fizikalne količine, kot smo definirali nelinearni program v prvem poglavju /1.1/ do /1.3/. Dokaj uspešno so rešili problem optimizacije tudi v primeru, ko množica možnih rešitev ni konveksna.

Čeprav je bila optimizacija fizikalnih količin pri danem sistemu omejitev zadovoljivo rešena, so bili tehnologi v mnogih primerih nezadovoljni z dobljenimi rezultati. V praksi nam namreč bolj malo pomaga podatek, katera receptura nam da najboljšo katerokoli izmed fizikalnih lastnosti oziroma najcenejšo zmes, če so ostale fizikalne lastnosti na meji še dovoljenih vrednosti. Nekatere lastnosti zmesi se namreč medsebojno izključujejo; na primer: zmes z veliko trdoto ima zelo slabe predelovalne lastnosti. S tehnološkega stališča definiramo "optimalno zmes" kot zmes, v kateri so kar najboljše vse merljive fizikalne količine. Seveda v določenih primerih še vedno iščemo najcenejšo zmes ali zmes z optimalnimi fizikalnimi vrednostmi, kadar hočemo razviti kakšno prav posebno zmes oziroma gumen izdelek, največkrat pa vendarle naletimo na tehnološko definiran problem optimizacije /3/.

C. Harrington /4/ je matematično obdelal podoben problem pri določevanju kvalitete izdelkov, ker več različnih faktorjev vpliva na končno kvaliteto izdelka. Ugotovil je, da je običajno zelo težko določiti skupno kvaliteto izdelka zato, ker nanjo vpliva cela vrsta merljivih in nemerljivih dejavnikov, ki niso neodvisni drug od drugega. Pojavilo se je vprašanje fizikalnih enot sestavljene mere za kvaliteto – običajno ne povedo ničesar –

in pa tudi vprašanje, kako primerno poudariti bolj važne lastnosti. Vsi ti problemi so rešljivi, če nam uspe transformirati merljive fizikalne in nemerljive subjektivno ocenjene lastnosti izdelka v brezdimenzijsko skalo, enako za vse lastnosti. Običajno vzamemo za to skalo kar interval (0,1) tako, da določa transformirana vrednost 0 popolnoma neuporaben izdelek in 1 izdelek najboljše kvalitete. Kot bomo videli kasneje, sta važni še vrednosti $\frac{1}{e} = 0,36778$ in $1 - \frac{1}{e} = 0,63$, ki razmejujeta zelo slabe izdelke od srednje dobrih oziroma srednje dobre od zelo kvalitetnih.

Derringer je Harringtonovo transformacijo prenesel nespremenjeno v problem določanja tehnološko optimalne zmesi.

4.1. **Transformacija fizikalnih količin v brezdimenzijsko skalo "d"**

Za vsako fizikalno količino določi tehnolog meje, v katerih je zmes še dobra in sicer na enega od naslednjih načinov:

- a) določi spodnjo in zgornjo mejo fizikalne količine, pri čemer je najboljša vrednost približno na sredini intervala (obojestransko omejena fizikalna količina),
- b) določi samo spodnjo mejo pri takšnih fizikalnih količinah, pri katerih so vse večje vrednosti boljše in so od neke vrednosti naprej enako dobre (navzdol omejena fizikalna količina),
- c) določi samo zgornjo, še dovoljeno mejo, pri takšnih fizikalnih količinah, kjer so vse manjše vrednosti boljše; tudi tu določi mejo, pri kateri so vse manjše vrednosti enako dobre (navzgor omejena fizikalna količina).

Najenostavnejša transformacija možnih intervalov fizikalnih količin v interval (0,1) je naslednja:

$$/4.1/ \quad d = \begin{cases} 1 & \text{če je fizikalna količina znotraj intervala} \\ & \text{dovoljenih vrednosti,} \\ 0 & \text{sicer} \end{cases}$$

Takšna transformacija ima precej pomanjkljivosti, ker predpiše dovoljenim vrednostim enako transformirano vrednost in ne upošteva kvalitete fizikalnih vrednosti znotraj možnega intervala. Ker bi bila vsaka možna zmes že optimalna, je transformacija /4.1/ neprimerna za optimizacijo. Harringtonova transformacija "d" upošteva vse tri možnosti obnašanja fizikalnih lastnosti v intervalih možnih vrednosti in to na naslednji način:

ad a) Transformacija obojestransko omejenih fizikalnih količin je naslednja:

$$/4.2/ \quad d = e^{-(|v|)^t}$$

kjer je v linearna transformacija fizikalne količine Y takšna, da je

$$/4.3/ \quad v = \begin{cases} -1 & \text{ko je } Y \text{ na spodnji meji } Y_{min} \\ +1 & \text{ko je } Y \text{ na zgornji meji } Y_{max} \end{cases}$$

in je t pozitivno realno število, določeno za vsak primer posebej. Linearna transformacija /4.3/ se glasi takole:

$$/4.4/ \quad v = \frac{2Y - (Y_{max} + Y_{min})}{Y_{max} - Y_{min}}$$

Transformacija /4.2/ predstavlja družino krivulj (odvisno od t) z naslednjimi lastnostmi:

- asimptotično se približujejo vrednosti $d = 0$, ko raste v preko vrednosti $v_2 = v(Y_{max})$, oziroma, ko zavzame v vrednost manjše od $v_1 = v(Y_{min})$,
- pri $v=1$ ima vrednost $\frac{1}{e} = 0,37$, zato smo tudi izbrali to vrednost za ločnico med dobrimi in slabimi zmesmi,
- na sredini intervala $[v_1, v_2]$ ima vrednost $d=1$,
- pri povečanju $n \rightarrow \infty$ dobi transformacija /4.2/ obliko transformacije /4.1/.

Na sliki 4.1 na strani 62 si lahko ogledamo obliko krivulj /4.2/ za različne vrednosti t . Eksponent t lahko določimo tako, da predpišemo pri izbrani vrednosti transformacije v tudi višino ordinate d :

$$/4.5/ \quad t = \frac{\ln(\ln(\frac{1}{d}))}{\ln(|v|)}$$

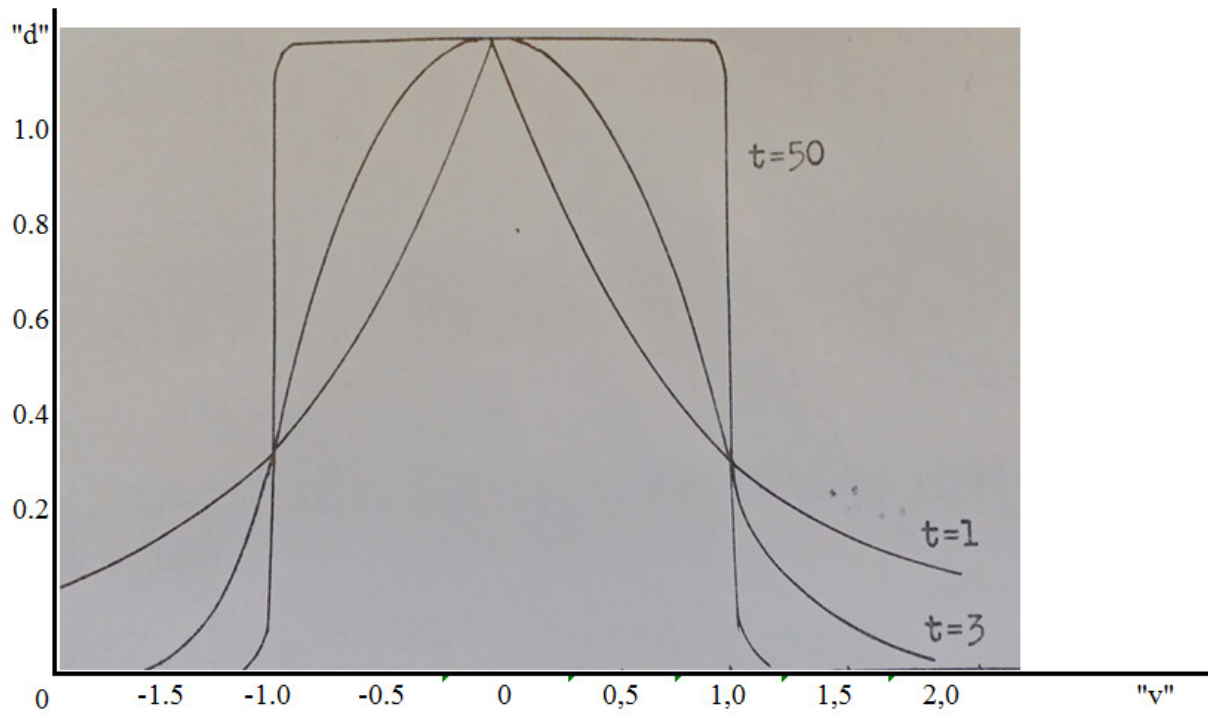
ad b) Transformacija navzdol omejenih fizikalnih količin je naslednja:

$$/4.6/ \quad d = e^{-(e^{-v})}$$

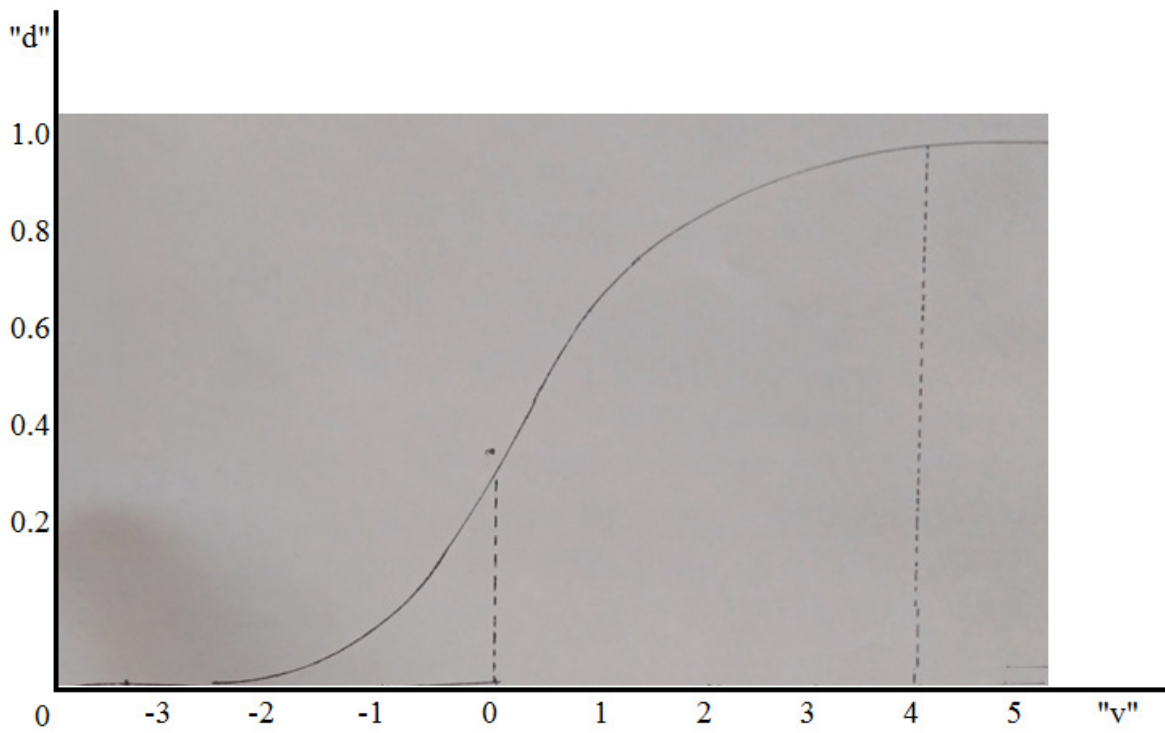
kjer je v linearna transformacija fizikalne količine Y naslednje oblike:

$$/4.7/ \quad v = b_0 + b_1 Y$$

Konstanti b_0 in b_1 določimo s pomočjo dveh izbranih točk d . Transformacija /4.6/ spet predstavlja družino krivulj, odvisnih od v , ki imajo naslednje lastnosti:



Slika 4.1 Grafi Harringtonove transformacije obojestransko omejenih količin



Slika 4.2 Grafi Harringtonove transformacije navzdol omejenih količin

- asimptotično se približujejo vrednosti $d=1$, ko raste v oziroma Y preko največje možne vrednosti,
- asimptotično se približujejo vrednosti $d=0$ pri vrednostih v oziroma Y manjših od Y_{min}
- vrednost v točki $v=0$ je $\frac{1}{e}$.

Pri našem delu smo izbrali $v=0$ pri $Y = Y_{min}$ in $v=4$ pri $Y = Y_{max}$, kjer je Y_{max} tista vrednost fizikalne količine, ki je praktično enako dobra kot vse večje, če so sploh realno dosegljive. Konstanti b_0 in b_1 sta tedaj:

$$/4.8/ \quad b_0 = \frac{4 Y_{min}}{Y_{max} - Y_{min}} \quad b_1 = \frac{4}{Y_{max} - Y_{min}}$$

Izbor $v=4$ pri $Y = Y_{max}$ je dobljen na osnovi praktičnih izkušenj. Pri manjših vrednostih so krivulje /4.6/ bolj položne, pri večjih pa bolj strmo naraščajo k vrednostim blizu $d=1$.

ad c) Transformacija navzgor omejene fizikalne količine je enaka transformaciji /4.6/, le da pri določitvi spremenljivke v zamenjata Y_{min} in Y_{max} svoji vlogi.

Zdaj, ko smo transformirali vsako fizikalno količino v brezdimenzijsko skalo d , lahko uporabimo kombinacijo teh d -jev za ugotavljanje skupne kvalitete zmesi. Po tehnološki definiciji dobre zmesi morajo imeti vse lastnosti kar najboljše vrednosti, že pri samo eni slabi lastnosti pa postane zmes neuporabna. Od tod ideja, da bi bila dobra mere kvalitete zmesi vsak takšen matematičen model, kjer nastopajo spremenljivke d_i v produktu. Izmed vseh takšnih možnosti sta Harrington in Derringer izbrala geometrijsko sredino /3/, /4/:

$$/4.9/ \quad D = \sqrt[n]{d_1, d_2, \dots, d_n}$$

Kot vidimo, je $D=0$, če je katerikoli izmed $d_i = 0$, oziroma je D zelo blizu 0, če je katerikoli izmed d_i blizu 0. Funkcijo D lahko vzamemo kot nelinearno namensko funkcijo v nelinearnem problemu /1.1/ do /1.4/, saj je zvezno odvedljiva funkcija spremenljivk sestavnih delov zmesi:

$$/4.10/ \quad D = f'' \begin{cases} f_1' [f_1(x_1, x_2, \dots, x_n)] \\ f_2' [f_2(x_1, x_2, \dots, x_n)] \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ f_m' [f_m(x_1, x_2, \dots, x_n)] \end{cases}$$

kjer smo z f označili funkcijsko odvisnost med variiranimi elementi zmesi in fizikalnimi lastnostmi Y_i (to je polinom drugega reda), z f' transformacijo v brezdimenzijsko skalo $d_i (i = 1, 2, \dots, m)$ in z f'' transformacijo v skupno mero za kvaliteto zmesi. Vendarle ostane odprto vprašanje eksistence globalnega optimuma, saj funkcija D prav gotovo ni konkavna. Enak problem smo srečali tudi pri bolj enostavnih namenskih funkcijah, ko smo iskali optimum določene fizikalne lastnosti zmesi.

George C. Derringer je prvi uvidel prednosti Harringtonove funkcije in jo uporabil v svoji metodi optimizacije gumenih zmesi. Ko smo v tretjem poglavju razpravljali o različnih algoritmi pri nelinearnem programiranju, smo omenili tudi algoritem SUMT, pri katerem vgradimo vse nelinearne in linearne omejitve v namensko funkcijo in potem iščemo optimum sestavljene funkcije. Iz definicije Harringtonove namenske funkcije je razvidno, da so vanjo že vgrajene vse nelinearne omejitve, zato lahko zapišemo nelinearni program /1.1/ do /1.3/ takole:

$$/4.11/ \quad \max D(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

pri pogojih

$$/4.12/ \quad s_i \leq x_i \leq z_i \quad i=1,2, \dots, n$$

Jasno je, da nelinearna programa /1.1/ do /1.3/ in /4.11/ do /4.12/ nista ekvivalentna, saj smo v prvotni definiciji lahko prosto izbirali tip namenske funkcije in postavili strožje nelinearne omejitve. S primerno izbiro števila t v /4.2/ pri obojestranskih omejitvah in koeficientov b_0 in b_1 v /4.8/ pri enostranskih omejitvah lahko poljubno natančno aproksimiramo nelinearne omejitve fizikalnih lastnosti /1.2/. Na ta način postane nelinearni program /4.11/ in /4.12/ dobra aproksimacija osnovnega nelinearnega programa /1.1/ do /1.3/ pri iskanju tehnološko optimalnih zmesi, to je zmesi z najboljšo možno kombinacijo vseh fizikalnih lastnosti. Običajno omejitve fizikalnih količin niso preveč natančno določene, ker dopuščamo precejšnja odstopanja v zgornji in spodnji meji, zato zadostuje že $t \geq 3$ pri obojestranskih omejitvah. Tudi enostranske omejitve brez težav prilagodimo osnovnim intervalom. Nelinearni program /4.11/ in /4.12/ je mnogo bolj enostaven tudi zato, ker ima samo linearne omejitve in ga lahko rešimo z metodo konveksnih kombinacij. Vendar se je Derringer raje poslužil ideje algoritma SUMT (/1/ stran 610) in vgradil v namensko funkcijo tudi linearne omejitve /4.12/. To je storil na dva načina: z metodo DEFUNCT in MINIMAX-D.

4.2. Metoda DEFUNCT

V teoriji načrtovanja poizkusov smo definirali disperzijsko funkcijo eksperimentalne sheme. Ugotovili smo, da vrednosti disperzijske funkcije zelo hitro rastejo, ko neodvisne spremenljivke zapustijo eksperimentalno domeno /1.3/. Spoznali smo, da je pri vrtljivih shemah disperzijska funkcija samo funkcija oddaljenosti od centra. V splošnem je disperzijska funkcija eksperimentalnih shem drugega reda polinom četrte stopnje, ki zelo hitroraste pri vrednosti neodvisnih spremenljivk izven intervalov /1.3/ tudi pri nevtljivih shemah in celo pri skupinah eksperimentov, ki niso urejeni tipi eksperimentalnih shem. Za popolnoma poljubno skupino eksperimentov definiramo disperzijsko funkcijo s pomočjo disperzije napake pri odvisnih spremenljivkah:

$$/4.13/ \quad V(\hat{Y}_k) = s^2 x_k^T (X^T X)^{-1} x_k \quad k=1,2, \dots, N$$

kjer je:

s^2 - ocenjena vrednost za disperzijo napake pri aproksimaciji, dobljena s pomočjo analize variance,

X - matrika potenc in medsebojnih produktov standardiziranih spremenljivk poljubne eksperimentalne sheme D,

x_k - vektor "neodvisnih spremenljivk".

Disperzijska funkcija je potem

$$/4.14/ \quad V(x) = \frac{NV(\hat{X}_k)}{s^2}$$

Kot primer si pogledjmo disperzijsko funkcijo eksperimentalne sheme drugega reda treh spremenljivk. Shemo D sestavimo s pomočjo tabele 2.2 na strani 36 iz drugega poglavja.

/4.14/

$$D = \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 \\ -1 & +1 & +1 \\ +1 & -1 & -1 \\ +1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & -1 \\ +1 & +1 & +1 \\ -1,633 & 0 & 0 \\ +1,633 & 0 & 0 \\ 0 & -1,633 & 0 \\ 0 & +1,633 & 0 \\ 0 & 0 & -1,633 \\ 0 & 0 & +1,633 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Matriko X dobimo iz eksperimentalne sheme D tako, da upoštevamo vse "neodvisne spremenljivke" polinoma drugega reda in konstantni člen. Prikazujemo jo v tabeli /4.15/ na strani 68.

Vektor "neodvisnih spremenljivk" x se glasi:

$$/4.16/ \quad x^T = (1, x_1, x_2, \dots, x_n, x_1^2, \dots, x_n^2, x_1x_2, \dots, x_{n-1}x_n)$$

Disperzijsko funkcijo za naš primer s tremi spremenljivkami izračunamo takole:

$$V(x) = 20x^T(X^T X)^{-1} x)$$

/4.15/

x_0	x_1	x_2	x_3	x_1^2	x_2^2	x_3^2	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3
1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1
1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1
1	-1	1	-1	1	1	1	-1	1	-1
1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	1
1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
1	1	-1	1	1	1	1	-1	1	-1
1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	-1,633	0	0	2,66	0	0	0	0	0
1	+1,633	0	0	2,66	0	0	0	0	0
1	0	-1,633	0	0	2,66	0	0	0	0
1	0	+1,633	0	0	2,66	0	0	0	0
1	0	0	-1,633	0	0	2,66	0	0	0
1	0	0	+1,633	0	0	2,66	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Za primer napišimo vektor "neodvisnih spremenljivk" v točki (1,1,-1):

$$x_k^T = (1, 1, 1, -1, 1, 1, 1, 1, -1, -1)$$

Lahko se prepričamo, da je disperzijska funkcija eksperimentalne sheme /4.14/ enaka:

$$\begin{aligned} V(x) = & 0,165385 + 0,07572x_1^4 + 0,07572x_2^4 + 0,07572x_3^4 + \\ & + 0,1358178x_1^2x_2^2 + 0,1358178x_1^2x_3^2 + 0,1358178x_2^2x_3^2 - \\ & - 0,040384x_1^2 - 0,040384x_2^2 - 0,040384x_3^2 \end{aligned}$$

Derringer je vzel negativno disperzijsko funkcijo $V(x)$ kot dodatno odvisno spremenljivko in jo transformiral v skalo d kot navzdol omejeno količino. Kot vemo, moramo določiti dve vrednosti disperzijske funkcije in skale d , da lahko izračunamo konstanti b_0 in b_1 v /4.8/. Navadno vzamemo

$$\begin{aligned} /4.18/ \quad v = 0 \quad \text{pri} \quad -V(x) = -1 \quad \text{in} \\ v = 4 \quad \text{pri} \quad -V(x) = -0,16 \end{aligned}$$

tako izračunamo:

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{4}{-0,16 - (-1)} = \frac{4}{0,84} = 4,76 \\ b_0 &= \frac{-4 \cdot (-1)}{-0,16 - (-1)} = \frac{4}{0,84} = 4,76 \\ v &= 4,76 - 4,76 V(x) \end{aligned}$$

Ker nastopa v Harringtonovi funkciji D m fizikalnih lastnosti, je v metodi DEFUNCT Derringerjeva namenska funkcija

$$/4.19/ \quad D(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sqrt[m+1]{d_1 \cdot d_2 \dots d_m \cdot d_{m+1}}$$

kjer je d_{m+1} transformirana vrednost negativne disperzijske funkcije eksperimentalne sheme.

Nelinearni program smo prevedli v problem iskanja maksimuma funkcije D pri neomejenih neodvisnih spremenljivkah. Vendar pa funkcija D v splošnem ni konkavna in nam zato dela optimizacija preglavice. Če je pri roki računalnik, si lahko pomagamo na več načinov. Približni položaj optimuma določimo s pomočjo tabeliranja funkcije v dovolj gosti mreži točk. Pravi optimum potem poiščemo s pomočjo ustrezno izbranega algoritma za določitev maksimuma funkcije več spremenljivk. V našem računskem centru imamo zbirko matematično-statističnih programov, v kateri so tudi algoritmi za računanje ekstremov funkcij več spremenljivk. Uporabili smo algoritem avtorjev R. FLETCHER in M. J. POWELL /13/, ki ima vgrajene rutine za pospešitev konvergence. Izbor metode za določitev maksimuma Derringerjeve funkcije je pomemben samo iz čisto numerično-tehničnih razlogov in nam ob uporabi računalnika da skoraj vsaka metoda optimalno rešitev v primerno kratkem času.

Prednosti metode DEFUNCT za določevanje tehnološko optimalnih zmesi so očitne. Ni nam potrebno iskati optimuma vsake fizikalne količine posebej, saj so v optimalni zmesi prav vse izbrane v najboljši možni kombinaciji. Nadaljnja prednost metode je v tem, da je lahko število merjenih fizikalnih lastnosti zelo veliko, ker to malo vpliva na težavnost izračuna namenske funkcije. Tudi število neodvisnih spremenljivk je lahko večje. Praktično je v metodi DEFUNCT edina omejitev zmogljivost laboratorijev, kjer moramo za več neodvisnih spremenljivk narediti precej večje število poizkusov.

Za vsako dobljeno optimalno rešitev moramo opraviti še stabilitetno analizo rešitve. Če se vrednosti funkcije D močno spreminjajo pri majhnih spremembah neodvisnih spremenljivk, potem je rešitev nestabilna. Razlogi za nestabilnost optimuma so naslednji:

- pri obojestransko omejenih fizikalnih količinah smo slabo določili meje in z njimi seveda tudi najboljšo vrednost ali pa eksponent t , ki nam pove, kako hitro smo nezadovoljni z vrednostmi za fizikalne količine, ko se le-te oddaljujejo od najboljše, ki leži v sredini intervala med spodnjo in zgornjo mejo,
- pri enostranskih omejitvah fizikalnih količin smo neprimerno določili koeficienta linearne transformacije /4.7/ in s tem preveč ali premalo poudarili pomembnost teh količin v celotni zmesi,
- aproksimativni polinom preslabo opisuje dejansko odvisnost pri točkah, ki so daleč od ničelne recepture.

Zelo malo je verjetno, da bi se katerakoli izmed lastnosti gume zelo hitro spreminjala pri majhnih spremembah količin sestavin zmesi. Pri vseh dosedaj izvršenih optimizacijah smo s primerno izbiro parametrov dobili stabilne rešitve. Vendar pa niso bili redki primeri, da so se laboratorijski rezultati močno razlikovali od izračunanih vrednosti optimalne recepture. Rekli smo že, da je gumena zmes zelo komplicirana zmes, ki zaradi makromolekularne sestave otežkoča natančno določanje merljivih fizikalno-kemičnih lastnosti. Skoraj vedno so bili laboratorijski rezultati slabši od izračunane optimalne zmesi. Razlike nastanejo zaradi velikih eksperimentalnih napak, ki se jih v gumarstvu ne moremo izogniti. Zato je Derringer izdelal novo metodo, v kateri poteka optimizacija ob upoštevanju eksperimentalnih napak.

4.3. Metoda MINIMAX - D

Vse do sedaj omenjene metode so določale optimum na osnovi predhodno izmerjenih laboratorijskih podatkov. S pomočjo regresijske analize izračunamo koeficiente polinoma drugega reda, s pomočjo disperzijske funkcije eksperimentalne sheme in analize variance izmerjenih vrednosti pa dobimo intervale zaupanja za vsako fizikalno količino pri danem koeficientu zaupanja. Vendar je zaradi narave gumenih zmesi ponavljivost poizkusov izredno majhna. Za primer lahko povemo, da dobimo 40 - 50 % izmerjenih vrednosti natezne trdnosti izven intervala zaupanja s koeficientom zaupanja 95 %, ki smo ga izbrali v regresijski analizi. Podobne probleme srečamo skoraj pri vsehmerljivih fizikalnih lastnostih. Očitno je, da moramo upoštevati eksperimentalne napake v procesu optimizacije gumenih zmesi. V ta namen nam metoda MINIMAX-D predlaga, naj namesto pričakovanih vrednosti fizikalnih količin Y_i transformiramo v brezdimenzijsko skalo d minimalne pričakovane vrednosti, to je vrednosti z meje intervala zaupanja pri danem koeficientu zaupanja. Nadaljnja optimizacija poteka enako kot v metodi DEFUNCT. Interval zaupanja pri danem koeficientu zaupanja izračunamo iz enačbe:

$$/4.20/ \quad CL = t \sqrt{s^2 + s^2 V(x)}$$

kjer je

t - vrednost, ki jo najdemo v statistični tabeli t pri dani stopnji značilnosti in številu prostostnih stopenj

s^2 - ocenjena vrednost eksperimentalne napake, dobljena iz analize variance

$V(x)$ - standardizirana disperzijska funkcija, ki smo jo definirali v drugem poglavju in uporabili tudi že v metodi DEFUNCT

Minimalno pričakovano vrednost Y_i^{\wedge} izračunamo za različne tipe omejitev odvisnih spremenljivk Y_i takole:

1. Pri obojestransko omejenih fizikalnih količinah Y_i vzamemo $Y_i^{\wedge} = Y_i - CL$, če je Y_i na intervalu $[Y_{min}, \bar{Y}]$, oziroma $Y_i^{\wedge} = Y_i + CL$, če je Y_i na intervalu $[\bar{Y}, Y_{max}]$. Pri tem smo označili spodnjo mejo z Y_{min} , zgornjo mejo z Y_{max} in najboljšo vrednost, ki je na sredini tolerančnega intervala, z \bar{Y} .
2. Pri navzdol omejeni fizikalni količini Y_i vzamemo vrednost $Y_i^{\wedge} = Y_i - CL$.
3. Podobno vzamemo pri navzgor omejeni količini vrednost $Y_i^{\wedge} = Y_i + CL$.

Nove odvisne spremenljivke Y_i^{\wedge} transformiramo v brezdimenzijsko skalo d s pomočjo transformacij metode DEFUNCT. Tudi namenska funkcija D ostane ista, zato lahko uporabimo isto metodo optimizacije kot pri metodi DEFUNCT. Maksimalna vrednost D po metodi MINIMAX-D je vedno nižja od ustrezne vrednosti po metodi DEFUNCT, kar je razvidno tudi iz definicije novih odvisnih spremenljivk Y_i^{\wedge} . Kljub temu so recepture, dobljene z metodo MINIMAX-D precej bolj zanesljive, ker pri njih ostanejo tudi slabše vrednosti fizikalnih količin v tolerančnih intervalih.

Odgovorimo še na vprašanje, kdaj moramo uporabiti metodo MINIMAX-D namesto metode DEFUNCT. Povsem očitno je, da nam dasta obe metodi isti optimum, če ni eksperimentalnih napak oziroma so zanemarljivo majhne.

Odgovor na vprašanje nam da primerjava naslednjih intervalov: tolerančnih intervalov fizikalnih količin /1.2/ in intervalov zaupanja pri izbranem koeficientu zaupanja. Brž ko je interval zaupanja večji od tolerančnega intervala, se optimalni recepturi že močno razlikujeta. Derringer je ugotovil, da postanejo rezultati metode DEFUNCT neuporabni, ko je interval zaupanja dvakrat tolikšen, kot je tolerančni interval. Takšne primere kar velikokrat srečamo. Vemo tudi, katere fizikalne lastnosti gume imajo velike tolerančne intervale oziroma slabo ponovljivost meritev. Kot vidimo, mora biti v vsaki skupini, ki se ukvarja z optimizacijo gumenih receptur, tudi statistik, ki lahko v veliki meri vpliva na pravilen izračun optimalne zmesi.

V. RAČUNALNIŠKI PROGRAMI

V tem poglavju bomo opisali zaporedje programov, ki nam služijo za določitev optimalnih zmesi pri različnih tipih namenske funkcije. Odločili smo se, da z istim programom maksimiramo vse tipe namenskih funkcij, torej tudi Derringer-Harringtonovo funkcijo, čeprav smo videli v predhodnjem poglavju, da lahko dobimo njen optimum kot ekstrem ene same funkcije več spremenljivk. V ta namen smo napisali poseben program, ki nam je dal enake rezultate kot nelinearni program. Ker smo uporabili ta program samo za preverjanje rezultatov, ga nismo vključili v redno obdelavo in ga zato tu ne bomo opisali posebej.

Čeprav je že kar nekako v navadi, da uporabljamo v programiranju matematičnih problemov programski jezik FORTRAN, smo se v našem primeru raje odločili za programiranje v jeziku PL/I. Edini razlog za takšno odločitev je bil ta, da smo hoteli napisati povsem splošne programe, neodvisne od števila odvisnih in neodvisnih spremenljivk. Vse matrike in vektorji, ki nastopajo v Box-Wilsonovi metodi in v metodah nelinearnega programiranja, dobijo prave dimenzije šele med izvajanjem programa in zasedejo natanko toliko pomnilnika v računalniku, kolikršna je njihova dimenzija v konkretnem primeru. Maksimalna velikost problema optimizacije je tako odvisna edino od kapacitete računalnika. Poglejmo si to na enostavnem primeru. Nelinearne in linearne omejitve v nelinearnem programu lahko zapišemo v matrični pisavi takole:

$$/5.1/ \quad A x \leq 0$$

Vrstice matrice A so koeficienti polinoma drugega reda, zato ima matrika $\frac{n(n+1)}{2} + n + 1$ stolpcev, pri čemer je n število neodvisnih spremenljivk. Vektor x ima prav toliko elementov: konstanto, linearne člene in mešane člene. Matrika A ima toliko vrstic, kolikor je število odvisnih spremenljivk (merjenih fizikalnih lastnosti) in neodvisnih spremenljivk skupaj – denimo M. V programskem jeziku PL/I definiramo matriko A takole:

```
DECLARE A(M,N * (N + 1) + N + 1)BINARY FLOAT(53) CONTROLLED;
```

s to instrukcijo smo povedali dimenzijo matrice A, določili dvojno natančnost binarne aritmetike in s pridevnikom *CONTROLLED* navedli še to, da bo matrika definirana šele takrat, ko bomo določili vrednost za M in N. Med podatki za program morata biti tudi konkretni vrednosti za M in N (npr. M=7, N=5). Matrika A zavzema v spominu računalnika odmerjen prostor, ko se izvede instrukcija:

```
ALLOCATE A;
```

v našem primeru torej $A_{12,21}$. Če v nadaljnjem izvajanju programa matrice A ne rabimo več, sprostimo ustrezni del spomina z instrukcijo:

```
FREE A;
```

Sproščeni del spomina računalnika lahko zasedejo nove matrice ali vektorji, ki jih nanovo potrebujemo. Temu načinu programiranja smo priredili tudi vse matematično-statistične podprograme, ki smo jih uporabili pri našem delu.

Uvodoma smo že omenili posamezne faze v procesu iskanja optimalne zmesi.

V navadi je, da definirajo ničelno recepturo in tolerance gumarski tehnologi. V vsaki raziskovalni skupini sodelujejo tudi fiziki in kemiki, ki izberejo najvažnejše merljive lastnosti gume in določijo število odvisnih in neodvisnih spremenljivk. Njihova naloga je prav tako tudi določitev tipa omejitev za vsako odvisno spremenljivko posebej. Izkazalo se je, da je potrebno optimizacijo ponoviti pri različno postavljenih mejah, posebej še pri enostransko omejenih fizikalnih količinah. Prvi program v našem zaporedju programov za optimizacijo zmesi je program za izpis testnih receptur po Box-Wilsonovi metodi. Podrobneje si ga bomo ogledali malo kasneje. Tako dobljene testne recepture zmešamo v naših laboratorijih in izmerimo vse potrebne fizikalne količine. Poudariti moramo, da je potrebno poizkuse v laboratorijih izvesti zelo skrbno, ker vse nadaljnje delo močno zavisi od točnosti izmerjenih količin in natančnega doziranja variiranih elementov recepture. Vse nadaljnje delo opravita dva programa: program za določitev koeficientov aproksimativnega polinoma z analizo variance in program za izračun optimalne recepture pri različnih namenskih funkcijah. Poglejmo si zdaj nadrobneje vse tri programe.

5.1. Program za izpis testnih receptur

Vhodni podatki za izpis testnih receptur po Box-Wilson-Hunterjevi metodi načrtovanja poizkusov so naslednji:

- število neodvisnih spremenljivk (od 2 do 7)
- tip sheme (celotna ali polponovljena shema)
- intervali variiranja recepture (ničelna receptura je v sredini intervalov)

- nevarirani elementi recepture in kratek mešalni predpis z opombami (neobvezno, izpisuje se kot tekst)
- fizikalno-kemične lastnosti gume, ki jih merimo v laboratoriju.

Program ima vgrajeno tabelo 2.2 iz drugega poglavja, s pomočjo katere določi eksperimentalno shemo D, razdeljeno v ustrezno število ortogonalnih blokov. Poglejmo si enostaven primer:

Podatki: $k=3$, celotna shema.

Eksperimentalno shemo za tri spremenljivke smo prikazali v četrtem poglavju /4.14/ in ima skupno 20 poizkusov. Ko je določena eksperimentalna shema, včita program podatke o neodvisnih spremenljivkah in njihovih spodnjih ter zgornjih mejah. Na primer:

Neodvisna spremenljivka	sp.meja	zg.meja	ničelna rpt.
ULTRASIL VN3	4	25	14,5
ŽVEPLO	0,5	5	2,75
VULKACIT CZ	0,5	2,8	1,65

Za vsako spremenljivko je potrebno izračunati eksperimentalno enoto, to je vrednost neodvisne spremenljivke pri standardizirani vrednosti $x_i = 1$. (Spomnimo se transformacij neodvisnih spremenljivk v standardizirane v drugem poglavju /2.2/). Dejanske vrednosti neodvisnih spremenljivk dobimo iz enačbe:

$$/5.2/ \quad \xi_{iu} = \frac{s_i + z_i}{2} + \frac{z_i - s_i}{2\alpha} x_{ui} \quad \begin{array}{l} i=1,2, \dots, k \\ u=1,2, \dots, N \end{array}$$

kjer je $\alpha = 1,633$ pri ortogonalno blokirani shemi treh spremenljivk.

V našem primeru imamo:

$$/5.3/ \quad \text{ULTRASIL VN3:} \quad \xi_{u1} = 14,5 + \frac{21}{2 * 1,633} x_{u1}$$

$$\text{ŽVEPLO} \quad \xi_{u2} = 2,75 + \frac{4,5}{2 * 1,633} x_{u2}$$

$$\text{VULKACIT CZ} \quad \xi_{u3} = 1,65 + \frac{2,3}{2 * 1,633} x_{u3}$$

$$u=1,2, \dots ,20$$

kjer so x_{ui} elementi eksperimentalne sheme D /4.14/. Receptura, ki pripada prvi vrstici eksperimentalne sheme, je na primer takšnale:

/5.4/	<u>Neodvisna spremenljivka</u>	<u>količina</u>
	ULTRASIL VN3	6,43
	ŽVEPLO	1,38
	VULKACIT CZ	0,70

Program izpiše vseh 20 receptur, opremljenih še z drugimi podatki, ki jih želimo izpisati kot navodila (mešalni predpis, količine ostalih elementov recepture). Na vsaki recepturi izpiše še fizikalne količine, ki jih moramo meriti v laboratoriju, v takšni obliki, da laboranti vpisujejo rezultate merjenja kar na izpisane recepture. Te meritve že predstavljajo podatke za naslednji program.

5.2. Program za določitev koeficientov polinomov

V drugem poglavju smo na kratko omenili metodo najmanjših kvadratov, s pomočjo katere izračunamo koeficiente aproksimativnih polinomov. Rekli smo, da dobimo koeficiente z rešitvijo sistema:

$$/5.5/ \quad b = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

kjer je X matrika vseh spremenljivk polinoma drugega reda in Y vektor izmerjenih vrednosti neke fizikalne količine. Sistem /5.5/ ni nujno vezan na neko eksperimentalno shemo, velja prav splošno za kakršenkoli niz poizkusov. Prav zato je program prilagojen dvema različnima vrstama poizkusov: Box-Hunterjevimi shemam in poljubnim, neurejenim shemam.

Program najprej zahteva število poizkusov in število neodvisnih spremenljivk. Potem prečita vse recepture, v katerih imajo neodvisne spremenljivke dejanske vrednosti, in sestavi matriko eksperimentov D . V naslednji rutini transformira spremenljivke ξ_i v standardizirane spremenljivke x_i s transformacijo /2.2/. Matriko D razširi v matriko X standardiziranih "neodvisnih spremenljivk" ter izračuna $(X^T X)^{-1}$ s pomočjo podprograma za računanje inverznih matrik. Pro Box-Hunterjevih shemah je to vedno možno, ker determinanta matrike $X^T X$ ni nikoli nič. Pri drugačnih, poljubnih eksperimentalnih shemah pa se pogosto zgodi, da je matrika $X^T X$ singularna. V takšnem primeru program prekine z delom. Navadno si tedaj pomagamo tako, da izpustimo nekaj eksperimentov in naredimo dodatno še nove. Prav zaradi tega dejstva in pa zaradi večje eksperimentalne napake pri neurejenih shemah smo skoraj povsem prešli na Box-Hunterjeve sheme.

Posebna rutina programa zdaj izračuna koeficiente disperzijske funkcije eksperimentalne sheme. Kot vemo, je disperzijska funkcija vrtljivih in skoraj vrtljivih shem polinom četrtega reda, ki ima skoraj vse koeficiente pri mešanih členih enake nič.

Naslednja faza programa je izračun koeficientov polinoma za vsako fizikalno količino posebej po formuli /5.5/. Za vsak izračunan polinom naredimo še analizo variance kot jo predlagata Box in Hunter. Mogoče ne bo odveč, če opozorimo na to, da so tako izračunani koeficienti polinomov vezani na standardizirane spremenljivke. Kadar želimo risati grafe fizikalnih odvisnosti v zmesi, moramo transformirati polinome v obliko, kjer nastopajo originalne neodvisne spremenljivke.

5.3. Program za reševanje nelinearnih programov

To je precej velik program, saj nam omogoča iskanje optimuma pri različnih namenskih funkcijah. Čeprav smo tudi napisali posebne programe za optimizacijo Harrington-Derringerjeve funkcije, nastopa ta funkcija v programu samo kot ena izmed možnih oblik namenske funkcije. Program poišče rešitev naslednjega nelinearnega programa:

$$/5.6/ \quad \max c(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

pri nelinearnih in linearnih pogojih:

$$\begin{aligned} /5.7/ \quad Y_i(x_1, x_2, \dots, x_n) - Z_i &\leq 0 & i=1,2, \dots, m \\ -Y_i(x_1, x_2, \dots, x_n) + S_i &\leq 0 \\ x_j - z_j &\leq 0 \\ -x_j + s_j &\leq 0 & j=1,2, \dots, n \end{aligned}$$

kjer so Y_i polinomi drugega reda in x_j standardizirane neodvisne spremenljivke. Z velikimi S_i in Z_i smo označili omejitve odvisnih spremenljivk Y_i , z malimi s_j in z_j pa spodnjo mejo oziroma zgornjo mejo neodvisnih spremenljivk v standardiziranih enotah.

Koeficiente polinomov, disperzijsko funkcijo sheme ter eksperimentalne napake odvisnih spremenljivk prenesemo v program kar iz predhodnega programa. Tako moramo določiti samo še naslednje podatke:

- spodnje in zgornje meje odvisnih spremenljivk
- začetno točko x^0 , če želimo vnaprej določiti izhodišče za prvo iteracijo
- spodnjo in zgornjo mejo neodvisnih spremenljivk
- tip namenske funkcije
- koeficiente namenske funkcije v primerih, ko iščemo najcenejšo zmes ali pa optimalne vrednosti posameznih fizikalno-kemičnih lastnosti zmesi.

Grobi blokdiagram glavnega programa in podprograma za reševanje nelinearnih programov (NELPROG) prikazujemo na koncu tega poglavja.

Začetno točko x^0 vključimo med podatke takrat, kadar nas zanima lokalni optimum v njeni bližini ali pa takrat, kadar kako drugače vemo za položaj globalnega optimuma. Navadno torej začetne točke ne vključimo med podatke. Podprogram MREŽA razdeli vse intervale neodvisnih spremenljivk na predpisano število podintervalov (navadno 5) in izračuna vrednosti namenske funkcije na vseh mejah podintervalov. Tako določi točko, v kateri ima namenska funkcija največjo vrednost. Koordinate točke z največjo vrednostjo namenske funkcije vrne v glavni program kot začetno točko x^0 . Podprograma DEFUNCT in MINIMAX-D izračunata Derringerjeve transformacije in poiščeta vrednost Harrington-Derringerjeve namenske funkcije v dani točki x^k . Uporabljajo jo tudi vsi ostali podprogrami, kadar je tip namenske funkcije Harrington-Derringerjeva funkcija: MREŽA, NELPROG in MAXCX.

Kot vidimo iz blokdiagrama, izračuna glavni program poleg tehnološko optimalne zmesi tudi še optimalne vrednosti vseh fizikalnih količin, ki nastopajo v nelinearnih pogojih. To naredi zaradi primerjave vrednosti fizikalnih količin v tehnološko optimalni zmesi z optimalnimi vrednostmi posameznih lastnosti gume. V primerih, kadar ne iščemo tehnološko optimalne zmesi, program po potrebi izračuna začetno točko in poišče samo maksimum dane namenske funkcije. Kadar je namenska funkcija cena zmesi, išče program $\max(-c(x_1, x_2, \dots, x_n))$.

Podprogram NELPROG je sestavljen po algoritmu metode možnih smeri povečanja namenske funkcije. (Opisali smo ga v tretjem poglavju). Najprej izračuna parcialne odvode za pomožni linearni program, ki je v celoti takšenle:

$$/5.8/ \quad \max x_0$$

pri pogojih

$$/5.9/ \quad \begin{aligned} x_0 - \sum_{j=1}^n \frac{\partial c(x)}{\partial x_j} p_j &\leq - \sum_{j=1}^n \frac{\partial c(x)}{\partial x_j} s_j \\ x_0 + \sum_{j=1}^n \frac{\partial Y_i(x)}{\partial x_j} p_j &\leq - Y_i(x) + Z_i + \sum_{j=1}^n \frac{\partial Y_i(x)}{\partial x_j} s_j \\ x_0 - \sum_{j=1}^n \frac{\partial Y_i(x)}{\partial x_j} p_j &\leq - Y_i(x) - S_i - \sum_{j=1}^n \frac{\partial Y_i(x)}{\partial x_j} s_j \end{aligned}$$

$$x_0 + p_j \leq -x_j + z_j + s_j$$

$$x_0 - p_j \leq x_j - z_j - s_j$$

$$p_j \leq b + s_j$$

$$\begin{array}{l} i=1,2, \dots, n \\ j=1,2, \dots, m \end{array}$$

kjer smo že naredili linearno transformacijo smeri d_j v pozitivne spremenljivke p_j , za konstanto b pa navadno vzamemo kar 1.

$$/5.10/ \quad p_j = d_j + s_j$$

V matrični pisavi se linearni program glasi:

$$/5.11/ \quad \max x_0$$

pri pogoju

$$/5.12/ \quad AP \leq B$$

Vektor P je sestavljen iz smeri p_j in spremenljivke x_0 .

$$/5.13/ \quad P^T = (p_1, p_2, \dots, p_n, x_0)$$

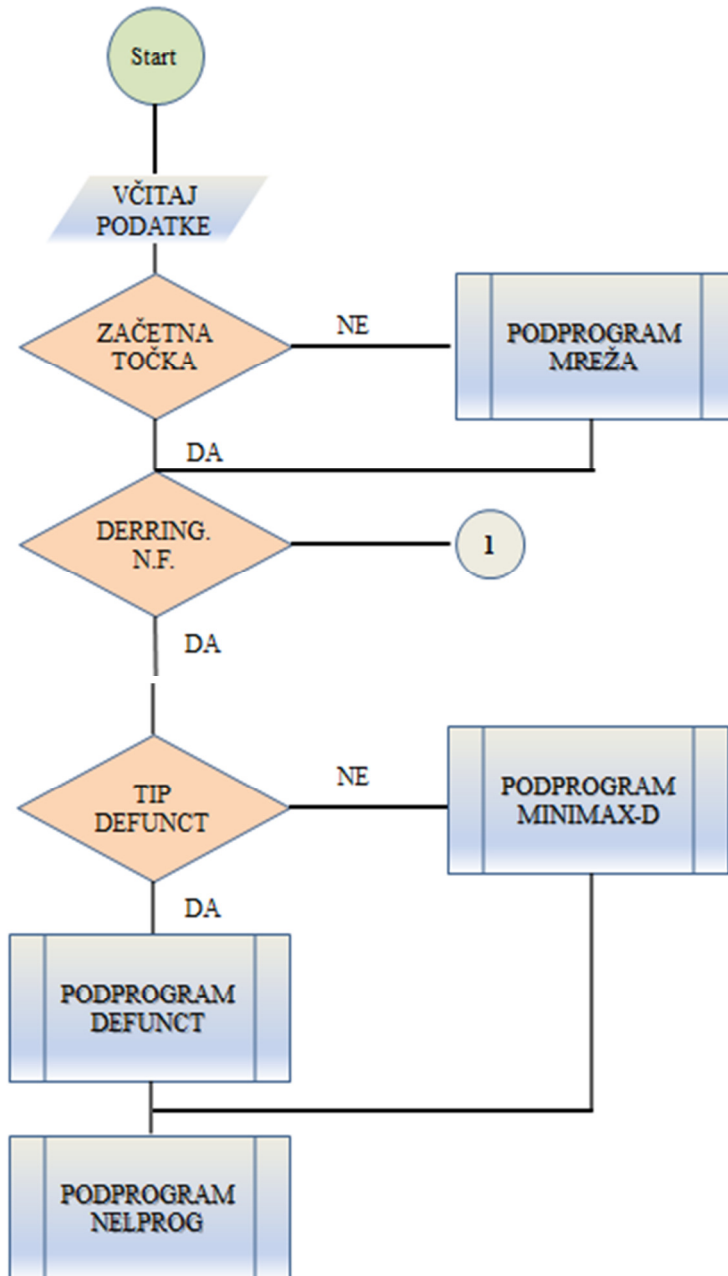
Linearni program /5.11/ in /5.12/ rešimo s pomočjo revidirane SIMPLEX metode, sprogramirane v podprogramu SIMPLEX. Podprogram je sestavil Lloyd E.G. Parker in ga najdemo v zbirki Contributed program library firme IBM. Ker je napisan v programskem jeziku FORTRAN, smo ga nekoliko modificiranega prevedli v jezik PL/I in vključili med ostale podprograme glavnega programa.

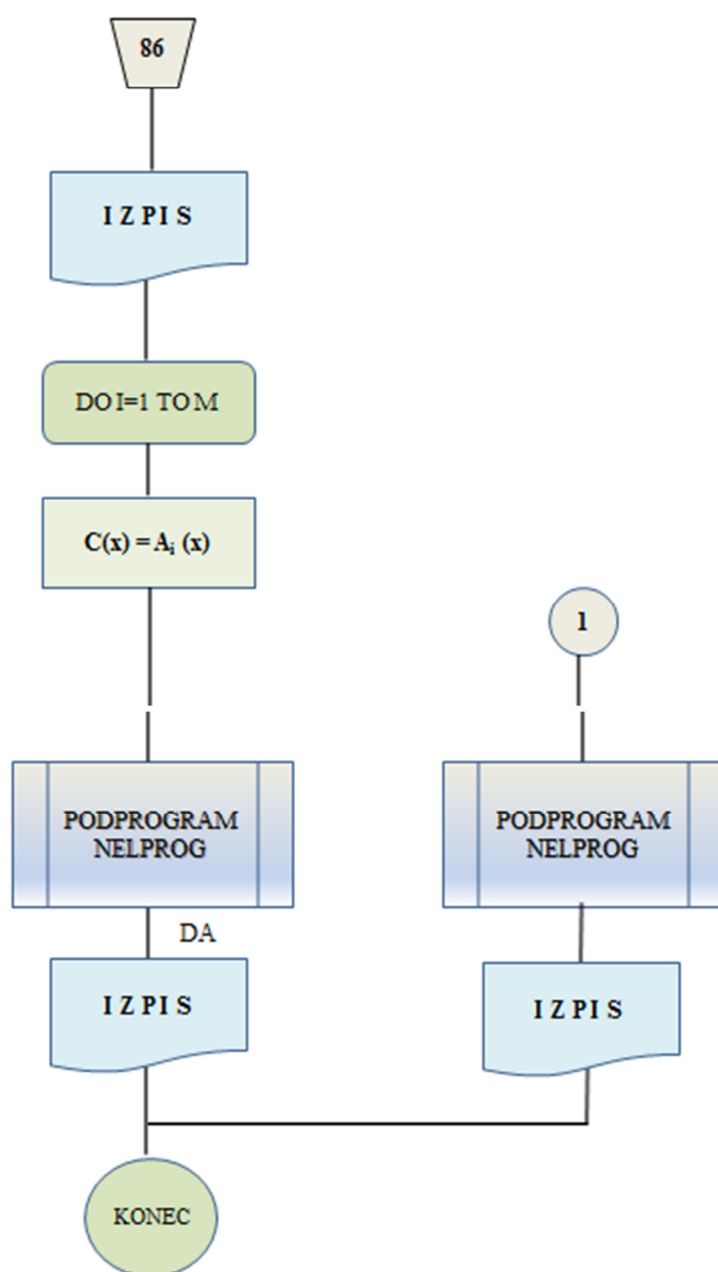
Podprogram MAXCX določi optimalno širino koraka t , s pomočjo katere

izračunamo novo rešitev v smereh d_j . Najprej poišče najmanjše in največje število t_{min} in t_{max} , pri katerih je točka $x^k + td^k$ še možna rešitev nelinearnega programa. Potem določi na intervalu (t_{min}, t_{max}) takšno število t , pri katerem je vrednost namenske funkcije $c(x^k + td^k)$ največja.

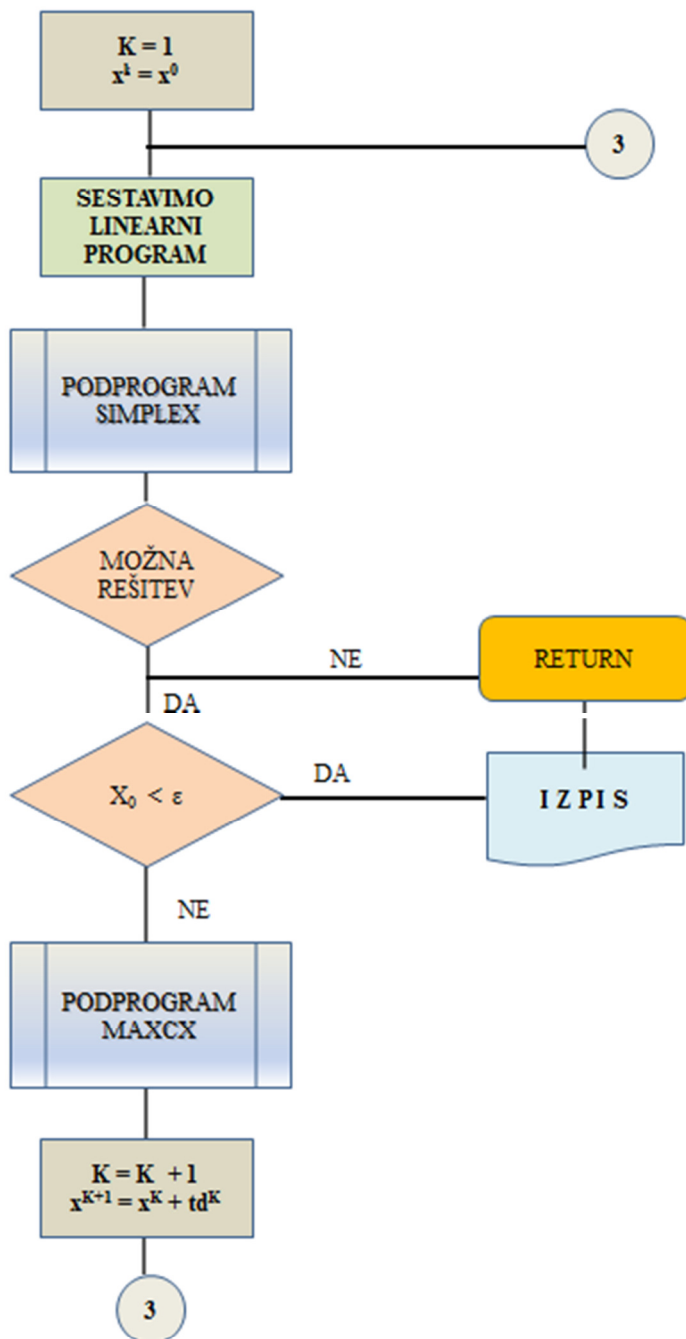
Program za reševanje nelinearnega programa je doživel že več sprememb in jih bo tudi še v bodoče. Vanj bomo vključili vse nove ideje in izkušnje, ki si jih bodo nabrali naši tehnologi in tudi izkušnje tujih gumarskih strokovnjakov. Za konec povejmo še približno dolžino izvajanja programov na računalniku. Izpis testnih receptur po Box-Wilsonovi metodi potrebuje približno eno minuto za shemo s štirimi neodvisnimi spremenljivkami. Regresijska analiza z analizo variance za sedem odvisnih spremenljivk traja približno 5 do 7 minut. Čas, potreben za določitev optimalne zmesi, zavisi od tipa namenske funkcije. Najdlje traja program pri Derringer-Harringtonovi namenski funkciji in sicer približno 20 minut za sistem s sedmimi odvisnimi in štirimi neodvisnimi spremenljivkami. Vse programe smo izvajali v lastnem računskem centru na računalniku IBM-370/135.

Grobi blokdigram glavnega programa





Grobi blokdigram podprograma NELPROG



SEZNAM LITERATURE

- /1/ Harvey M. Wagner: "Principles of operations research"
Prentice/Hall International editions, London 1972
- /2/ G.E.P.Box and J.S.Hunter: "Multi-factor experimental design for exploring response surfaces", Ann. Math. Stat. London 1957
- /3/ George C. Derringer: "A powerful digital method for rubber compound optimization". PPG Industries, Inc. Chemical Division
Barberton, Ohio
- /4/ Edwin C. Harrington: "The desirability function".
Industrial Quality Control, april 1965
- /5/ Lloyd E.G. Parker: "Fortran linear programming system"
IBM Contributed program library
- /6/ Paul E. Gatza and Robert C. Mcmillan: "The use of experimental design and computerized data analysis in elastomer development studies". Am. Chem. Soc. Cincinnati, 1972, Paper No. 6
- /7/ E. J. Buckler and I. M. Kristensen: "Use of response equations for appraisal of elastomers". Rubber age, marec 1967
- /8/ George C. Derringer: "Statistically designed experiments".
Rubber age, november 1969
- /9/ R. A. Beaumont, N. E. Hartmann, C. M. Chamberlain: "A digital computer program for compound optimization".
Rubber chemistry and technology
- /10/ N. R. Drapor and H. Smith: "Applied regression analysis".
John Wiley and Sons, Inc., New York, 1966
- /11/ W. E. Claxton, Dale Pearson, R. E. Clarke and F. S. Conant:
"Role of computers in elastomer research". Rubber chemistry and technology.
- /12/ Prof. dr. Ljubomir Martić: "Nelinearno programiranje".
Informator-Zagreb, 1973
- /13/ IBM - Scientific subroutine package.

